



MACARENA  
ALESSANDRA  
COLLAO MORALES

ENERGIA DOS GRAFOS





**MACARENA  
ALESSANDRA  
COLLAO MORALES**

## **ENERGIA DOS GRAFOS**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Matemática e Aplicações, área de especialização em Ciências da Computação, realizada sob a orientação científica da Doutora Enide Cascais Silva Andrade Martins, Professora Auxiliar do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro e do Doutor Domingos Moreira Cardoso, Professor Catedrático do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro.



**o júri / the jury**

presidente / president

**Professora Doutora Isabel Maria Simões Pereira**

Professora Auxiliar do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro

vogais / examiners committee

**Professor Doutor Pedro Jorge Santos Freitas**

Professor Auxiliar da Universidade de Lisboa - Faculdade de Ciências

**Professora Doutora Enide Cascais Silva Andrade Martins**

Professora Auxiliar do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro (orientadora)



## **Agradecimientos**

Sentir gratitud y no expresarla es como envolver un regalo y no darlo. Comienzo por agradecer a mis orientadores Profesora Enide Martins y Profesor Domingos Cardoso por su apoyo desde un inicio, por haber mostrado paciencia y generosidad en entregarme los conocimientos que hoy poseo y por haber disponibilizado su preciado tiempo.

Sin duda alguna, agradezco también a mi Profesor Dr. Óscar Rojo, por haberme formado, desde hace ya varios años, por alentarme y apoyarme en la decisión de estudiar fuera.

Cómo olvidar a mi familia Portuguesa y mi amiga Marianna, son uno de los tesoros que llevaré conmigo siempre. Gracias por haberme entregado tanto, más de lo que pude imaginar cuando puse un pie en este país. Por hacerme sentir como en casa. No me bastará vida para agradecer haberlos conocido.

Finalmente, agradezco a mi familia, por apoyarme en una etapa más, que ahora finalizo. Por estar siempre pendiente de mí. Prometo compensar todo el tiempo que no estuve con ustedes.





**Palavras-chave**

Energia de um grafo; grafo hiperenergético; grafo hipoenergético; valores próprios de um grafo.

**Resumo**

Uma das aplicações mais importantes da Teoria Espectral dos Grafos na área da Química está relacionada com a correspondência muito estreita existente entre a energia  $\pi$  – *electron* de uma molécula e os valores próprios do grafo que a representa. Esta correspondência por si só é motivação suficiente para o estudo da energia dos grafos. Nesta dissertação, para além de se introduzirem os conceitos e terminologia básicos da Teoria dos Grafos necessários para o estudo da energia (que se define como sendo a soma dos valores absolutos dos valores próprios de um grafo), determinam-se as expressões para a energia de algumas classes de grafos. Adicionalmente, apresentam-se vários majorantes e minorantes para energia dos grafos e, por último estudam-se os grafos hiperenergéticos e hipoenergéticos.



**Keywords**

Energy of a graph; hyperenergetic graph; hypoenergetic graph; eigenvalues of a graph.

**Abstract**

One of the most important applications of Spectral Graph Theory in Chemistry is related with the thin correspondence between the  $\pi$  – *electron* energy of a molecule and the eigenvalues of the graph which represents the molecule. This correspondence is a sufficient motivation for the study of graph energy. In this work, besides the introduction of concepts and the basic terminology of Graph Theory needed for the study of the energy (which is defined as the sum of the absolute values of the eigenvalues of a graph), mathematical expressions for some classes of graphs are determined. Furthermore, several upper and lower bounds for the energy of graphs are presented and the hyperenergetic and hypoenergetic graphs are analyzed.



“Daria tudo o que sei,  
por metade do que ignoro.”

– *René Descartes*



# Conteúdo

Conteúdo	i
Tabela de Símbolos	1
1 Introdução	3
2 Energia de um grafo	11
3 Minorantes e majorantes para a energia de um grafo	17
4 Grafos hiperenergéticos e hipoenergéticos	47
4.1 Energia de grafos hiperenergéticos . . . . .	47
4.2 Energia de grafos hipoenergéticos . . . . .	54
5 Conclusões	69
Bibliografia	71





# Tabela de Símbolos

$\mathbb{R}^n$	Espaço linear sobre $\mathbb{R}$ dos vectores de dimensão $n$ , com elementos em $\mathbb{R}$ , escritos sob a forma de matriz-coluna.
$ \cdot $	Valor absoluto em $\mathbb{R}$ .
$\ \cdot\ $	Norma vetorial em $\mathbb{C}$ .
$I_n$	Matriz identidade de ordem $n$ .
$O_{n_1 \times n_2}$	Matriz de ordem $n_1 \times n_2$ cujas entradas são todas iguais a 0.
$J_n$	Matriz de ordem $n$ cujas entradas são todas iguais a 1.
$A^T$	Matriz transposta de $A$ .
$A^k$	Matriz potência de ordem $k$ da matriz $A$ .
$\text{tr}(A)$	Traço de $A$ .
$\det(A)$	Determinante de $A$ .
$P_G(\lambda)$	Polinómio característico do grafo $G$ .
$\lambda_i$	$i$ -ésimo valor próprio de um grafo.
$(\lambda, \mathbf{x})$	Par próprio do grafo $G$ .
$V(G)$	Conjunto dos vértices do grafo $G$ .
$E(G)$	Conjunto das arestas do grafo $G$ .
$\emptyset$	Conjunto vazio.
$i \sim j$	Vértice $i$ adjacente com o vértice $j$ .
$ij$	Aresta formada pelos vértices $i$ e $j$ .
$G' \subset G$	$G'$ é um subgrafo de $G$ .
$G_1 \cong G_2$	Os grafos $G_1$ e $G_2$ são isomorfos.

$G_1 \cup G_2$	União dos grafos $G_1$ e $G_2$ .
$K_n$	Grafo completo com $n$ vértices.
$K_{r,s}$	Grafo bipartido completo.
$P_n$	Caminho com $n$ vértices.
$C_n$	Ciclo com $n$ vértices.
grafo- $(n, m)$	Grafo com $n$ vértices e $m$ arestas.
$S_n$	Estrela com $n$ vértices.
$\mathcal{L}(G)$	Grafo linha do grafo $G$ .
$\overline{G}$	Grafo complementar do grafo $G$ .
$aG$	Grafo formado por $a$ cópias de $G$ .
$H_n$	Hiperoctaedro com $n$ vértices.
$A(G)$	Matriz de adjacência do grafo $G$ .
$D(G)$	Matriz diagonal cujas entradas diagonais são os graus dos vértices do grafo $G$ .
$a_{ij}$	Entrada $(i, j)$ da matriz $A(G)$ .
$R(G)$	Matriz de incidência do grafo $G$ .
$d_i$	Grau do vértice $i$ do grafo $G$ .
$N_i$	Conjunto dos vértices adjacentes ao vértice $i$ do grafo $G$ .
$\mathcal{E}(G)$	Energia do grafo $G$ .
$\sin(\alpha)$	Seno do ângulo $\alpha$ .
$\cos(\alpha)$	Cosseno do ângulo $\alpha$ .
$Cf_n$	Grafo conferência com $n$ vértices.
$\Delta(G)$	Grau máximo do grafo $G$ .
$\delta(G)$	Número de vértices pendentos do grafo $G$ .
$f'$	Primeira derivada da função $f$ .
$M_k(G)$	$k$ -ésimo momento espectral do grafo $G$ .

# Capítulo 1

## Introdução

Nesta introdução apresentam-se conceitos e resultados básicos, e terminologia necessários da Teoria dos Grafos para compreender esta dissertação.

Para tornar este texto o mais autocontido possível, para vários resultados clássicos apresentam-se as respectivas demonstrações. Por razões de espaço, ao longo deste texto omitem-se algumas demonstrações que no entanto podem ser encontradas nas referências que se apresentam.

Um grafo  $G = (V(G), E(G))$  está definido pelo seu conjunto de vértices  $V(G)$  e pelo seu conjunto de arestas  $E(G)$ . A cardinalidade de  $V(G)$  é chamada a ordem de  $G$  e a cardinalidade de  $E(G)$  o tamanho de  $G$ . Um grafo com  $m$  arestas e  $n$  vértices designa-se **grafo**-( $n, m$ ). Num grafo não orientado,  $E(G)$  é um conjunto de pares não ordenados de vértices. Diz-se que o grafo  $G$  é vazio se  $V(G) = \emptyset$ , trivial se  $|V(G)| = 1$ , e nulo se  $E(G) = \emptyset$ .

Dois vértices  $i, j \in V(G)$  são adjacentes, e escreve-se  $i \sim j$ , quando estão ligados por uma aresta  $ij \in E(G)$ . Seja  $N_i = \{j \in V(G) : j \sim i\}$ , o conjunto de vértices adjacentes ao vértice  $i$ . O grau do vértice  $i$ , denotado por  $d_i$ , é a cardinalidade do conjunto  $N_i$ . Se  $d_i = 0$ ,  $i$  diz-se vértice isolado.

Um lacete é uma aresta que tem ambos os extremos num mesmo vértice, e arestas paralelas são arestas que têm os vértices extremos iguais. Ao longo deste texto só se consideram grafos simples, ou seja, sem arestas paralelas nem lacetes, e não orientados.

**Definição 1.1** [1] *Seja  $G = (V(G), E(G))$  um grafo. Quando  $G' = (V(G'), E(G'))$  é um grafo satisfazendo  $V(G') \subset V(G)$  e  $E(G') \subset E(G)$  escreve-se  $G' \subset G$  e diz-se que  $G'$  é um **subgrafo** de  $G$ . Quando  $G' \subset G$  é tal que dois vértices são adjacentes em  $G'$  se e somente se eles são adjacentes em  $G$ , diz-se que  $G'$  é um **subgrafo induzido** de  $G$ .*

Na seguinte definição apresentam-se alguns tipos especiais de grafos que aparecerão ao longo deste texto (ver por exemplo [1, 24]).

**Definição 1.2** *Um **grafo completo** de ordem  $n$ ,  $K_n$ , é um grafo em que cada par de vértices são adjacentes. O número de arestas de  $K_n$  é igual a  $\frac{n(n-1)}{2}$ .*

Um grafo  $G$  é chamado **grafo regular de grau  $k$**  ou  **$k$ -regular** se todos os vértices de  $G$  têm grau  $k$ .

Dado um grafo  $G$ , designa-se por **passeio** em  $G$  entre os vértices  $i$  e  $j$ , a toda a sequência não vazia de vértices e arestas da forma

$$i = v_0, v_0v_1, v_1, \dots, v_{k-1}, v_{k-1}v_k, v_k = j,$$

com eventual repetição de vértices e arestas, onde os vértices  $v_0$  e  $v_k$  são vértices extremos do passeio (chamados vértices inicial e final do passeio, respetivamente). Se o grafo é simples, então um passeio fica completamente determinado pela sequência dos sucessivos vértices. O **comprimento do passeio** é dado pelo número de arestas que este percorre.

Um **trajeto** num grafo é um passeio sem arestas repetidas, e um **caminho** é um passeio sem vértices repetidos com eventual exceção dos vértices inicial e final. Denota-se um caminho com  $n$  vértices por  $P_n$ . Um caminho que comece e acabe no mesmo vértice designa-se por **ciclo**. Denota-se um ciclo com  $n$  vértices por  $C_n$ .

Um grafo diz-se **conexo** se entre cada par de vértices existe um caminho que os une. Caso contrário diz-se não conexo ou desconexo.

Se  $G$  é um grafo desconexo, diz-se que  $G' \subset G$  é uma **componente conexa** de  $G$  quando  $G'$  é um grafo conexo e não existe um grafo conexo  $H \subset G$  tal que  $G' \subset H$  e  $G' \neq H$ .

Um grafo conexo e sem ciclos é uma **árvore**, enquanto um grafo desconexo e sem ciclos é chamado floresta. Note-se que uma árvore de ordem  $n$  tem tamanho  $m = n - 1$ .

Um grafo  $(n, m)$   $G$  é chamado **unicíclico**, **bicíclico** e **tricíclico** se  $G$  é simples e conexo com  $m = n$ ,  $m = n + 1$ , e  $m = n + 2$ , respetivamente.

Um grafo  $G = (V(G), E(G))$  diz-se **bipartido** se existe uma partição do conjunto de vértices  $V(G) = V_1(G) \dot{\cup} V_2(G)$  tal que para todo  $ij \in E(G)$  se tem  $i \in V_1(G)$  e  $j \in V_2(G)$ .

Se  $V(G) = V_1(G) \dot{\cup} V_2(G)$  com  $|V_1| = r$  e  $|V_2| = s$ , tal que para todo  $i \in V_1(G)$  e todo  $j \in V_2(G)$ , se tem  $ij \in E(G)$ , então  $G = (V(G), E(G))$  é chamado **grafo bipartido completo**, e escreve-se  $G = K_{r,s}$ . Um grafo bipartido completo com  $n$  vértices da forma  $K_{1,n-1}$  designa-se por **grafo estrela** e é denotado por  $S_n$ .

Constrói-se o **grafo linha**  $\mathcal{L}(G)$  de um grafo  $G$  tomando as arestas de  $G$  como vértices de  $\mathcal{L}(G)$  e ligando dois vértices de  $\mathcal{L}(G)$  quando as arestas correspondentes em  $G$  possuírem um vértice comum. É fácil ver que se  $G$  é um grafo regular de grau  $k$  então  $\mathcal{L}(G)$  é um grafo regular de grau  $2k - 2$ .

O **grafo complementar** de um grafo  $G = (V(G), E(G))$  é o grafo  $\overline{G} = (V(\overline{G}), E(\overline{G}))$ , onde  $V(\overline{G}) = V(G)$  e  $ij \in E(\overline{G})$  quando  $ij \notin E(G)$ . É claro que  $E(G) \cup E(\overline{G}) = E(K_n)$ , logo, se  $|V(G)| = n$ ,

$$|E(G)| + |E(\overline{G})| = |E(K_n)| = \frac{n(n-1)}{2}. \quad (1.1)$$

Dados dois grafos  $G_1 = (V(G_1), E(G_1))$  e  $G_2 = (V(G_2), E(G_2))$  com  $V(G_1) \cap V(G_2) = \emptyset$ , a sua **união** é o grafo  $G_1 \cup G_2$  que tem conjunto de vértices  $V(G_1) \cup V(G_2)$  e conjunto

de arestas  $E(G_1) \cup E(G_2)$ . Para qualquer grafo conexo  $G$ , escreve-se  $aG$  para indicar o grafo que é a união de  $a$  cópias de  $G$ .

Seja  $G$  o grafo formado pela união de  $s$  cópias de  $K_2$ . O grafo complementar de  $G$ , com  $n = 2s$  vértices, é chamado **hiperoctaedro** ou **cocktail party graph** e denotado por  $H_n$ . Note-se que  $H_n$  é um grafo regular de grau  $n - 2$ . De (1.1), o número de arestas de  $H_n$  vem dado por

$$\begin{aligned} |E(H_n)| &= |E(K_{2s})| - |E(sK_2)| \\ &= \frac{2s(2s-1)}{2} - s \\ &= 2s(s-1) \\ &= n\left(\frac{n}{2} - 1\right). \end{aligned}$$

Para ilustrar o anterior, considere-se  $H_6$  apresentado na Figura 1.1 que tem  $12 = 6\left(\frac{6}{2} - 1\right)$  arestas.

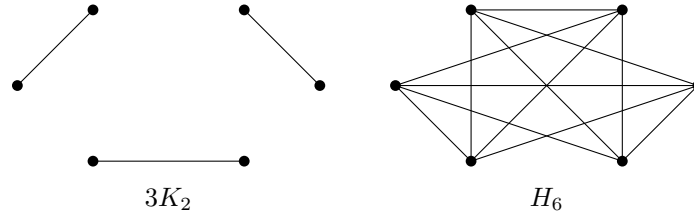


Figura 1.1:

**Definição 1.3** [1] Dois grafos,  $G_1$  e  $G_2$  são **isomorfos**, e escreve-se  $G_1 \cong G_2$ , quando existe uma correspondência biunívoca entre os seus conjuntos de vértices de modo que as adjacências sejam preservadas.

**Definição 1.4** [1] A **matriz de adjacência** de um grafo  $(n, m)$   $G$ , denotada por  $A(G)$ , é a matriz real simétrica de ordem  $n$  cujas entradas  $a_{ij}$  são:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } ij \in E(G) \text{ para } i, j \in V(G); \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

**Definição 1.5** [1] O polinómio característico da matriz de adjacência  $A(G)$  de um grafo  $G$ , ou seja,  $\det(\lambda I - A(G))$ , é denominado **polinómio característico de  $G$**  e denotado por  $P_G(\lambda)$ ;  $\lambda$  é um **valor próprio do grafo  $G$**  quando  $\lambda$  é uma raiz de  $P_G(\lambda)$ . O vetor  $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$  satisfazendo  $A(G)\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$  é chamado **vetor próprio de  $G$** , e qualquer par  $(\lambda, \mathbf{x})$  é chamado par próprio de  $G$ .

**Exemplo 1.1** Para o grafo da Figura 1.2, a matriz de adjacência é

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

**Definição 1.6** [17] A **matriz de incidência** de um grafo- $(n, m)$   $G$ , denotada por  $R(G)$ , é a matriz de ordem  $m \times n$  cujas entradas são:

$$r_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } e_i \text{ é uma aresta incidente no vértice } j; \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

**Exemplo 1.2** Para o grafo da Figura 1.2, a matriz de incidência é

$$R(G) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

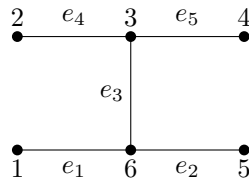


Figura 1.2: Grafo  $G$

Seja  $G$  um grafo simples não orientado, com  $n$  vértices e  $m$  arestas, e seja  $A = A(G) = (a_{ij})$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ , a matriz de adjacência de  $G$ . Os valores próprios  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  de  $A$  são considerados por ordem não crescente e são designados por valores próprios de  $G$ . Dado que  $A$  é uma matriz simétrica com traço igual a zero, estes valores próprios são reais e a sua soma é igual a zero. Assim, tem-se que

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \text{ e } \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = 0.$$

Adicionalmente, pode afirmar-se que se  $G$  tem pelo menos uma aresta então  $\lambda_1 \geq 1$  e  $\lambda_n \leq -1$ . Na verdade,  $\lambda_1 = 1$  se e só se todas as componentes conexas de  $G$  são grafos completos.

Um resultado clássico é o seguinte, ver por exemplo [3].

**Proposição 1.1** [3] *Sejam  $G$  um grafo- $(n, m)$ ,  $A = A(G)$  a matriz de adjacência de  $G$  e  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  os seus valores próprios. Então,*

$$2m = \text{tr}(A^2) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \quad (1.2)$$

**Demonstração.** Seja  $A = A(G) = (a_{ij})$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ , a matriz de adjacência do grafo  $G$ .

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

A entrada  $(i, j)$  da matriz  $A^2$  é dada por

$$\sum_{k=1}^n a_{ik} a_{kj}.$$

Em particular, dado que  $A$  é simétrica, a entrada  $(i, i)$  de  $A^2$  é

$$\sum_{k=1}^n a_{ik} a_{ki} = \sum_{k=1}^n a_{ik}^2.$$

Logo, o traço de  $A^2$  é

$$\begin{aligned} \text{tr}(A^2) &= \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n a_{ik}^2 \\ &= a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 + \dots + a_{1n}^2 \\ &\quad + a_{21}^2 + a_{22}^2 + a_{23}^2 + \dots + a_{2n}^2 \\ &\quad + a_{31}^2 + a_{32}^2 + a_{33}^2 + \dots + a_{3n}^2 \\ &\quad + \dots \\ &\quad + a_{n1}^2 + a_{n2}^2 + a_{n3}^2 + \dots + a_{nn}^2. \end{aligned}$$

Dado que  $a_{ii} = 0 \ \forall i = 1, \dots, n$  e  $a_{ij} = a_{ji}$ ,  $\forall i, j = 1, \dots, n$  tem-se que

$$\begin{aligned} \text{tr}(A^2) &= 2a_{12}^2 + 2a_{13}^2 + \dots + 2a_{1n}^2 \\ &\quad + 2a_{23}^2 + \dots + 2a_{2n}^2 \\ &\quad + 2a_{34}^2 + \dots + 2a_{3n}^2 \\ &\quad + \dots \\ &\quad + 2a_{n-1n}^2 \\ &= 2(a_{12}^2 + a_{13}^2 + \dots + a_{1n}^2 + a_{23}^2 + \dots + a_{2n}^2 + a_{34}^2 + \dots + a_{3n}^2 + \dots + a_{n-1n}^2). \end{aligned}$$

Se os vértices  $i$  e  $j$  são adjacentes, então  $a_{ij}^2 = 1$ , conseqüentemente o traço de  $A^2$  vai ser igual a duas vezes o número de arestas do grafo, ou seja:

$$\text{tr}(A^2) = 2m. \quad (1.3)$$

Assim,

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = \text{tr}(A^2) = 2m.$$

□

**Observação 1.1** *Note-se que, as entradas diagonais da matriz  $A^2$  correspondem ao número de passeios de comprimento 2 que começam e acabam no vértice  $i$ , ou seja, o grau do vértice  $i$ , para  $i = 1, \dots, n$  (ver [7, pag. 14, Prop. 1.3.4]). Assim, a equação  $\text{tr}(A^2) = 2m$ , diz-nos que a soma dos graus dos vértices de  $G$  é igual ao dobro do número de arestas. Ou seja, se  $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$  é a sequência dos graus dos vértices de  $G$ , então  $\sum_{i=1}^n d_i = 2m$ , onde  $n$  e  $m$  são a ordem e o tamanho de  $G$ , respectivamente.*

**Proposição 1.2** [3] *Sejam  $G$  um grafo- $(n, m)$ ,  $A = A(G)$  a matriz de adjacência de  $G$  e  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  os seus valores próprios. Então,*

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j = -m.$$

**Demonstração.** Seja  $\phi_A(x)$  o polinómio característico de  $A$ :

$$\begin{aligned} \phi_A(x) &= \det(xI_n - A) \\ &= x^n + p_1x^{n-1} + p_2x^{n-2} + \dots + p_{n-1}x + p_n. \end{aligned}$$

Pelo Método de Leverrier [28], os coeficientes de  $\phi_A(x)$  vêm dados pelas seguintes relações

$$\begin{aligned} p_1 &= -s_1 \\ p_2 &= -\frac{1}{2}(s_2 + p_1s_1) \\ &\vdots \\ p_n &= -\frac{1}{n}(s_n + p_1s_{n-1} + \dots + p_{n-1}s_1), \end{aligned}$$

onde  $s_1, s_2, \dots, s_n$  são tais que

$$\begin{aligned} s_1 &= \text{tr}(A) \\ s_2 &= \text{tr}(A^2) \\ &\vdots \\ s_n &= \text{tr}(A^n). \end{aligned}$$



Considerando o coeficiente de  $x^{n-2}$  no polinómio característico  $\phi_A(x)$ , tem-se que:

$$\begin{aligned}
p_2 &= \frac{1}{2}(s_2 + p_1 s_1) \\
&= \frac{1}{2}(s_2 + (-s_1) s_1) \\
&= \frac{1}{2}(s_2 - s_1^2) \\
&= \frac{1}{2}(tr(A^2) - (tr(A))^2) \\
&= \frac{1}{2}(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 - (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n)(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n)) \\
&= \frac{1}{2}[\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 \\
&\quad - (\lambda_1^2 + \lambda_1\lambda_2 + \dots + \lambda_1\lambda_n + \lambda_2\lambda_1 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_2\lambda_n + \dots + \lambda_n\lambda_1 + \lambda_n\lambda_2 + \dots + \lambda_n^2)] \\
&= -\frac{1}{2}(2\lambda_1\lambda_2 + 2\lambda_1\lambda_3 + \dots + 2\lambda_1\lambda_n + 2\lambda_2\lambda_3 + 2\lambda_2\lambda_4 + \dots + 2\lambda_2\lambda_n + \dots + 2\lambda_{n-1}\lambda_n) \\
&= -(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \dots + \lambda_1\lambda_n + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_2\lambda_4 + \dots + \lambda_2\lambda_n + \dots + \lambda_{n-1}\lambda_n) \\
&= -\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j. \tag{1.4}
\end{aligned}$$

Por outro lado, de acordo com (1.3),  $tr(A^2) = 2m$ . Então,

$$\begin{aligned}
p_2 &= \frac{1}{2}(tr(A^2) - (tr(A))^2) \\
&= \frac{1}{2}(2m - 0) \\
&= m. \tag{1.5}
\end{aligned}$$

Consequentemente, de acordo com (1.4) e (1.5),

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j = -m.$$

□

**Proposição 1.3** [1] *Seja  $G$  um grafo bipartido, então  $\lambda$  é um valor próprio de  $G$  se e somente se  $-\lambda$  é valor próprio de  $G$ .*

**Demonstração.** *Suponha-se que  $G$  é um grafo bipartido que admite a bipartição do conjunto de vértices*

$$V_1 = \{1, 2, \dots, n_1\} \quad e \quad V_2 = \{n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n = n_1 + n_2\}.$$

*Com esta etiquetagem do conjunto dos vértices, a matriz de adjacência de  $G$  tem a forma*

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & M \\ M^T & 0 \end{bmatrix}.$$

Considere-se o produto

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} -I_{n_1} & 0 \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} A(G) \begin{bmatrix} -I_{n_1} & 0 \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -I_{n_1} & 0 \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & M \\ M^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -I_{n_1} & 0 \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -M \\ M^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -I_{n_1} & 0 \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -M \\ -M^T & 0 \end{bmatrix} = -A(G). \end{aligned}$$

Este resultado mostra que  $A(G)$  e  $-A(G)$  são matrizes semelhantes, e então têm os mesmos valores próprios. Consequentemente, se  $\lambda > 0$  é um valor próprio de  $G$  então  $-\lambda$  também é.  $\square$

As provas dos seguintes resultados, que serão aplicados no estudo desta tese, podem ser encontradas em [1], [6] e [7].

**Proposição 1.4** [6, pag. 163] *Um grafo tem exatamente um valor próprio positivo se e só se os seus vértices não isolados formam um grafo completo multipartido.*

**Lema 1.1** [7] *Um grafo  $G$  de ordem  $n$  é regular de grau  $\lambda_1$  (onde  $\lambda_1$  é o maior valor próprio de  $G$ ) se e só se  $n\lambda_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2$ .*

**Proposição 1.5** [1] *Se  $G$  é um grafo- $(n, m)$   $k$ -regular então o polinómio característico da matriz de adjacência do grafo linha  $\mathcal{L}(G)$  é*

$$P_{\mathcal{L}(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} P_G(\lambda - k + 2).$$

Pelo seguinte resultado, é possível determinar os valores próprios do grafo complementar de um grafo  $k$ -regular.

**Proposição 1.6** [1] *Seja  $G$  um grafo  $k$ -regular com  $n$  vértices e valores próprios  $k, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ . Então  $G$  e o seu complementar  $\overline{G}$  possuem os mesmos vetores próprios e os valores próprios de  $\overline{G}$  são  $n - k - 1, -1 - \lambda_2, -1 - \lambda_3, \dots, -1 - \lambda_n$ .*

## Capítulo 2

# Energia de um grafo

A energia de um grafo  $G$ ,  $\mathcal{E}(G)$ , define-se como sendo

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|.$$

Este conceito de energia de um grafo foi introduzido na área da Química Teórica por I. Gutman em 1978 [9] e está relacionado com a energia  $\pi$  – *electron* numa molécula representada por um grafo (molecular).

A seguir, como exemplo, determina-se a energia de algumas classes de grafos.

**Exemplo 2.1** [1] *O grafo nulo com  $n$  vértices tem  $n$  valores próprios iguais a zero, e consequentemente, a sua energia é igual a zero.*

**Exemplo 2.2** [1] *O grafo completo com  $n$  vértices  $K_n$ , é o grafo complementar do grafo nulo, que é 0-regular. Logo, pela Proposição 1.6, os valores próprios de  $K_n$  são  $n - 1$  com multiplicidade 1 e  $-1$  com multiplicidade  $n - 1$ . Logo, a energia de  $K_n$  é:*

$$\mathcal{E}(K_n) = |n - 1| + (n - 1)|-1| = 2n - 2. \quad (2.1)$$

**Exemplo 2.3** [7] *Seja  $G = \frac{n}{2}K_2$  o grafo com  $n$  vértices e  $m = \frac{n}{2}$  arestas, obtido de  $\frac{n}{2}$  cópias de  $K_2$ . Seja  $A(G)$  a matriz de adjacência de  $G$ , uma matriz diagonal por blocos, onde cada bloco diagonal  $A_j$ , correspondente à matriz de adjacência de  $G_j = K_2$ , vem dado por*

$$A_j = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

*para  $j = 1, 2, \dots, \frac{n}{2}$ . O polinómio característico de cada componente conexa  $G_j$  é  $P_{G_j}(\lambda) = \lambda^2 - 1$ , para  $j = 1, 2, \dots, \frac{n}{2}$ . Então os valores próprios associados a  $\frac{n}{2}K_2$  são 1 e  $-1$ , ambos com multiplicidade  $\frac{n}{2}$ . Logo, a energia de  $\frac{n}{2}K_2$  vem dada por:*

$$\mathcal{E}\left(\frac{n}{2}K_2\right) = \frac{n}{2}|1| + \frac{n}{2}|-1| = \frac{n}{2} + \frac{n}{2} = n. \quad (2.2)$$

**Exemplo 2.4** [7] Para o grafo bipartido completo  $G = K_{n_1, n_2}$ , que admite a bipartição do conjunto de vértices

$$V_1 = \{1, 2, \dots, n_1\} \quad e \quad V_2 = \{n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n = n_1 + n_2\},$$

a matriz de adjacência é dada por:

$$A(G) = \begin{bmatrix} O_{n_1 \times n_1} & B \\ B^T & O_{n_2 \times n_2} \end{bmatrix}$$

onde  $B$  é uma matriz de ordem  $n_1 \times n_2$  com todas as entradas iguais a 1.

Seja  $\mathbf{e}$  o vetor coluna com  $n_1 + n_2$  entradas todas iguais a 1, e  $J_{n_j}$  a matriz quadrada de ordem  $n_j$  com todas as entradas iguais a 1, para  $j = 1, 2$ . Logo,

$$A(G)^2 \mathbf{e} = \begin{bmatrix} BB^T & O_{n_1 \times n_2} \\ O_{n_2 \times n_1} & B^T B \end{bmatrix} \mathbf{e} = \begin{bmatrix} n_2 J_{n_1} & O_{n_1 \times n_2} \\ O_{n_2 \times n_1} & n_1 J_{n_2} \end{bmatrix} \mathbf{e} = n_1 n_2 \mathbf{e}.$$

Por outro lado, dado que  $A(G)$  é uma matriz real simétrica, tem a seguinte decomposição espectral

$$A(G) = Q \Sigma Q^T,$$

onde  $Q$  é uma matriz ortogonal, e  $\Sigma$  é uma matriz diagonal cujas entradas diagonais são os valores próprios de  $A(G)$  [26, pag. 549]. Note-se que a característica de  $A(G)$  (igual a 2) é igual à característica de  $\Sigma$  (número de valores próprios que são distintos de zero), dado que  $Q$  é ortogonal. Logo,  $A(G)$  tem dois valores próprios que são distintos de zero,  $\sqrt{n_1 n_2}$  e  $-\sqrt{n_1 n_2}$ . Uma vez que o traço de  $A(G)$  é igual a zero, os valores próprios de  $K_{n_1, n_2}$  são  $\sqrt{n_1 n_2}, 0, \dots, 0, -\sqrt{n_1 n_2}$ .

Logo, a energia de  $K_{n_1, n_2}$  é:

$$\mathcal{E}(K_{n_1, n_2}) = 2\sqrt{n_1 n_2}. \quad (2.3)$$

Se  $n_1 = 1$  e  $n_2 = n - 1$ , obtém-se a estrela  $K_{1, n-1} = S_n$ , com  $n$  vértices. Logo,

$$\mathcal{E}(S_n) = 2\sqrt{n-1}. \quad (2.4)$$

**Exemplo 2.5** [1, 24] Considere-se a matriz de adjacência do ciclo com  $n$  vértices  $C_n$

$$A(C_n) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}_{n \times n}.$$

Note-se que  $A(C_n)$  é uma matriz circulante. A teoria deste tipo de matrizes, afirma que se  $[0, 1, 0, \dots, 0, 1]$  é a primeira linha de  $A(C_n)$  então, considerando-se o polinómio  $q(\lambda) = \lambda +$

$\lambda^{n-1}$ , tem-se que os valores próprios de  $A(C_n)$  são dados exatamente por  $q(\omega) = \omega + \omega^{n-1}$ , para cada raiz  $n$ -ésima  $\omega$  da unidade, (ver [1]). Então,  $\lambda_1 = q(1) = 2$  é valor próprio de  $A(C_n)$ . Expressando as outras  $n$ -ésimas raízes da unidade como potências de  $\omega = e^{\frac{2\pi i}{n}}$  obtém-se os outros valores próprios de  $A(C_n)$  dados por

$$\begin{aligned}\lambda_{j+1} &= q(\omega^j) = \omega^j + \omega^{j(n-1)} \\ &= e^{\frac{2\pi i}{n}j} + e^{\frac{2\pi i}{n}j(n-1)} \\ &= \cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{n}j(n-1)\right) + i\left[\sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{n}j(n-1)\right)\right]\end{aligned}$$

para cada  $j = 0, 1, \dots, n-1$ . Note-se que,

$$\begin{aligned}\sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{n}j(n-1)\right) &= \sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \sin\left(2\pi j - \frac{2\pi}{n}j\right) \\ &= \sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \sin(2\pi j)\cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) - \cos(2\pi j)\sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) \\ &= \sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) \\ &= 0,\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{n}j(n-1)\right) &= \cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \cos\left(2\pi j - \frac{2\pi}{n}j\right) \\ &= \cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \cos(2\pi j)\cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \sin(2\pi j)\sin\left(\frac{2\pi}{n}j\right) \\ &= \cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right) \\ &= 2\cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right).\end{aligned}$$

Consequentemente,

$$\lambda_{j+1} = 2\cos\left(\frac{2\pi}{n}j\right)$$

para cada  $j = 0, 1, \dots, n-1$ .

Logo, calculando a energia de  $C_n$  obtém-se (ver [8, 24]):

$$\mathcal{E}(C_n) = \begin{cases} \frac{4\cos(\frac{\pi}{n})}{\sin(\frac{\pi}{n})} & \text{se } n \equiv 0 \pmod{4} \\ \frac{4}{\sin(\frac{\pi}{n})} & \text{se } n \equiv 2 \pmod{4} \\ \frac{2}{\sin(\frac{\pi}{2n})} & \text{se } n \equiv 1 \pmod{2}. \end{cases}$$

**Exemplo 2.6** [24, 26] Considere-se o caminho com  $n$  vértices  $P_n$ . Para calcular o seus valores próprios, apresenta-se uma técnica que pode ser encontrada em [26, pag. 514]. A matriz de adjacência de  $P_n$  pode ser escrita na forma tridiagonal

$$A(P_n) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{bmatrix}_{n \times n}.$$

Seja  $(\lambda, \mathbf{x})$  um par próprio de  $A(P_n)$ . Logo,

$$(A(P_n) - \lambda I) \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

$$\begin{bmatrix} -\lambda & 1 & & & \\ 1 & -\lambda & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -\lambda & 1 \\ & & & 1 & -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

então as equações no sistema (2.5) vêm dadas por  $x_{k-1} - \lambda x_k + x_{k+1} = 0$ ,  $k = 1, \dots, n$  com  $x_0 = x_{n+1} = 0$  ou, equivalentemente,

$$x_{k+2} - \lambda x_{k+1} + x_k = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n-1 \text{ com } x_0 = x_{n+1} = 0.$$

Estas são equações diferenciais homogêneas de segunda ordem. A técnica é procurar soluções da forma  $x_k = \xi r^k$  para constantes  $\xi$  e  $r$ . Isto produz a equação quadrática  $r^2 - \lambda r + 1 = 0$  com raízes  $r_1$  e  $r_2$ , e pode-se provar que a solução geral de  $x_{k+2} - \lambda x_{k+1} + x_k = 0$  é

$$x_k = \begin{cases} \alpha r_1^k + \beta r_2^k & \text{se } r_1 \neq r_2 \\ \alpha \rho^k + \beta k \rho^k & \text{se } r_1 = r_2 = \rho, \end{cases} \quad \text{onde } \alpha \text{ e } \beta \text{ são constantes arbitrárias.}$$

Mas neste caso, como se trata da determinação das entradas de um vetor próprio,  $r_1$  e  $r_2$  devem ser distintas. Caso contrário,  $x_k = \alpha \rho^k + \beta k \rho^k$ , logo dado que  $x_0 = x_{n+1} = 0$ ,

$$\begin{aligned} 0 &= x_0 = \alpha \text{ e} \\ 0 &= x_{n+1} = \alpha \rho^{n+1} + \beta (n+1) \rho^{n+1} = \beta (n+1) \rho^{n+1} \implies \beta = 0, \end{aligned}$$

consequentemente  $x_k = 0$  para cada  $k = 1, \dots, n$ , o que é impossível uma vez que  $\mathbf{x}$  é um vetor próprio. Assim,  $x_k = \alpha r_1^k + \beta r_2^k$ . Logo,

$$\begin{cases} 0 = x_0 = \alpha + \beta \\ 0 = x_{n+1} = \alpha r_1^{n+1} + \beta r_2^{n+1} \end{cases} \implies \begin{cases} \alpha = -\beta \\ -\beta r_2^{n+1} = \alpha r_1^{n+1} \end{cases} \implies \left( \frac{r_1}{r_2} \right)^{n+1} = -\frac{\beta}{\alpha} = 1.$$

Então,

$$\frac{r_1}{r_2} = e^{\frac{2\pi i}{n+1}j} \implies r_1 = r_2 e^{\frac{2\pi i}{n+1}j} \text{ para algum } j = 1, \dots, n. \quad (2.6)$$

Uma vez que  $r_1$  e  $r_2$  são raízes da equação  $r^2 - \lambda r + 1 = 0$  tem-se que

$$\begin{aligned} r^2 - \lambda r + 1 &= (r - r_1)(r - r_2) \\ &= r^2 - (r_1 + r_2)r + r_1 r_2, \end{aligned}$$

logo

$$r_1 + r_2 = \lambda \quad (2.7)$$

$$r_1 r_2 = 1. \quad (2.8)$$

Tendo em conta (2.6) e (2.8) obtém-se

$$\begin{aligned} (r_2 e^{\frac{2\pi i}{n+1}j}) r_2 &= 1 \\ \Leftrightarrow r_2^2 &= e^{-\frac{2\pi i}{n+1}j} \\ \Leftrightarrow r_2 &= e^{-\frac{\pi i}{n+1}j}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Logo, de (2.6) e (2.9) obtém-se

$$\begin{aligned} r_1 &= \left( e^{-\frac{\pi i}{n+1}j} \right) e^{\frac{2\pi i}{n+1}j} \\ r_1 &= e^{\frac{2\pi i - \pi i}{n+1}j} \\ r_1 &= e^{\frac{\pi i}{n+1}j}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Consequentemente, de (2.7), (2.9) e (2.10) tem-se que

$$\begin{aligned} \lambda &= r_1 + r_2 \\ &= e^{\frac{\pi i}{n+1}j} + e^{-\frac{\pi i}{n+1}j} \\ &= \cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) + \cos\left(-\frac{\pi j}{n+1}\right) + i\left(\sin\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) + \sin\left(-\frac{\pi j}{n+1}\right)\right) \\ &= \cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) + \cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) + i\left(\sin\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) - \sin\left(\frac{\pi j}{n+1}\right)\right) \\ &= 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right). \end{aligned}$$

Conclui-se que os valores próprios do caminho com  $n$  vértices,  $P_n$ , são

$$\lambda_j = 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Logo, a energia do caminho  $P_n$  é (ver [24]):

$$\mathcal{E}(P_n) = \begin{cases} \frac{2}{\sin\left(\frac{\pi}{2(n+1)}\right)} - 2 & \text{se } n \equiv 0 \pmod{2} \\ \frac{2\cos\left(\frac{\pi}{2(n+1)}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2(n+1)}\right)} - 2 & \text{se } n \equiv 1 \pmod{2} \end{cases}$$





## Capítulo 3

# Minorantes e majorantes para a energia de um grafo

Existem alguns minorantes e majorantes simples para a energia de grafos. Veja-se por exemplo os apresentados em 1971 por McClelland [25].

**Proposição 3.1** [12] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  com pelo menos uma aresta e seja  $\lambda_1$  o maior valor próprio de  $G$ . Então*

$$\mathcal{E}(G) \geq \frac{2m}{\lambda_1}.$$

**Demonstração.** *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  com pelo menos uma aresta, e seja  $\lambda_1$  o maior valor próprio de  $G$ . Logo,  $\lambda_1 |\lambda_i| \geq \lambda_i^2$  para cada  $i = 1, 2, \dots, n$ . Consequentemente,*

$$\lambda_1 \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \geq \sum_{i=1}^n \lambda_i^2.$$

*Assim,*

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \\ &\geq \frac{1}{\lambda_1} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \\ &= \frac{2m}{\lambda_1}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

*A igualdade (3.1) decorre da Proposição 1.1.* □

Antes de introduzir a próxima proposição, relembra-se a desigualdade de Cauchy Schwarz (ver [21]). Dados  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$  e  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ , verifica-se a desigualdade

$$\sum_{j=1}^n x_j y_j \leq \|x\| \|y\|,$$

onde  $\|z\| = \sqrt{z_1^2 + z_2^2 + \dots + z_n^2}$ .

**Proposição 3.2** [25] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  e seja  $A$  a matriz de adjacência de  $G$ . Então:*

$$\sqrt{2m + n(n-1)|\det(A)|^{2/n}} \leq \mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2mn}.$$

*Verifica-se a igualdade  $\mathcal{E}(G) = \sqrt{2mn}$  se e só se  $G$  é um grafo nulo ou um grafo regular de grau 1, isto é,  $G \cong \frac{n}{2}K_2$ .*

**Demonstração.** Pela desigualdade de Cauchy Schwarz tem-se que:

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\lambda_1| \\ |\lambda_2| \\ \vdots \\ |\lambda_n| \end{bmatrix} \leq \sqrt{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n \lambda_i^2} = \sqrt{n \sum_{i=1}^n \lambda_i^2}. \quad (3.2)$$

Por (1.2) tem-se que

$$\sqrt{n \sum_{i=1}^n \lambda_i^2} = \sqrt{n(2m)}.$$

Consequentemente,

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2mn},$$

provando-se assim a desigualdade do lado direito.

Por outro lado, a igualdade  $\mathcal{E}(G) = \sqrt{2mn}$  verifica-se se e só se a desigualdade de Cauchy Schwarz (3.2) se verifica na forma de igualdade. Porém, sabe-se que esta igualdade se verifica se e só se os vetores  $[|\lambda_1| \ |\lambda_2| \ \dots \ |\lambda_n|]^T$  e  $[1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$ , ambos com  $n$  entradas, são linearmente dependentes, ou seja, se e só se  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_n|$ . Isto é verdadeiro se e só se  $G$  é um grafo nulo ou  $G \cong \frac{n}{2}K_2$ . Com efeito, suponha-se que existe um grafo  $G$ , distinto do grafo nulo e do grafo  $\frac{n}{2}K_2$ , para o qual  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_n|$ . Logo  $G$  tem uma componente conexa,  $G_k$ , com três ou mais vértices. Logo, a matriz de adjacência de  $G_k$  é uma matriz irredutível. Da Teoria de Perron Frobenius para matrizes não negativas, (ver [26], página 673), o maior valor próprio de  $G_k$  é positivo e tem multiplicidade 1. Uma vez que  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_n|$ , tem-se

$$0 > \lambda_2 = \lambda_3 = \dots = \lambda_n.$$

Isto não pode acontecer, porque o traço da matriz de adjacência de  $G$  seria diferente de zero dado que  $n \geq 3$ .

Prova-se agora a desigualdade do lado esquerdo da expressão. Atendendo a que

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{E}(G))^2 &= \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 = (|\lambda_1| + |\lambda_2| + \cdots + |\lambda_n|) (|\lambda_1| + |\lambda_2| + \cdots + |\lambda_n|) \\
 &= \lambda_1^2 + |\lambda_1| |\lambda_2| + |\lambda_1| |\lambda_3| + \cdots + |\lambda_1| |\lambda_n| \\
 &\quad + |\lambda_2| |\lambda_1| + \lambda_2^2 + |\lambda_2| |\lambda_3| + \cdots + |\lambda_2| |\lambda_n| \\
 &\quad + \cdots \\
 &\quad + |\lambda_n| |\lambda_1| + |\lambda_n| |\lambda_2| + |\lambda_n| |\lambda_3| + \cdots + \lambda_n^2 \\
 &= \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \\
 &= \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + \frac{n(n-1)}{n(n-1)} \left( 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \right) \\
 &= \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + n(n-1) \left( \frac{1}{\frac{n(n-1)}{2}} \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \right);
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

utilizando a igualdade (1.2) tem-se que

$$(\mathcal{E}(G))^2 = 2m + n(n-1) \left( \frac{1}{\frac{n(n-1)}{2}} \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \right). \tag{3.4}$$

Para saber quantos termos tem a soma:

$$\begin{aligned}
 \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| &= |\lambda_1| |\lambda_2| + |\lambda_1| |\lambda_3| + \cdots + |\lambda_1| |\lambda_n| \\
 &\quad + |\lambda_2| |\lambda_3| + \cdots + |\lambda_2| |\lambda_n| \\
 &\quad + \cdots \\
 &\quad + |\lambda_{n-1}| |\lambda_n|,
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

usa-se o seguinte argumento. Considerando os termos desta soma como as entradas que estão acima da diagonal principal da matriz quadrada

$$\begin{bmatrix}
 b_{11} & b_{12} & b_{13} & \cdots & b_{1n} \\
 b_{21} & b_{22} & b_{23} & \cdots & b_{2n} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 b_{(n-1)1} & b_{(n-1)2} & b_{(n-1)3} & \cdots & b_{(n-1)n} \\
 b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \cdots & b_{nn}
 \end{bmatrix},$$

isto é  $|\lambda_i| |\lambda_j| = b_{ij}$  para  $i < j$ , o número total de entradas na matriz,  $n^2$ , é a soma do número de entradas na diagonal principal com o dobro do número de entradas acima da diagonal principal. Tem-se então a relação:

$$n^2 = n + 2x.$$

Neste caso,  $x$  corresponde à quantidade de termos na soma (3.5). Portanto tem-se que

$$x = \frac{n^2 - n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Assim em (3.5) somam-se  $\frac{n(n-1)}{2}$  termos.

Para continuar, usar-se-á a desigualdade entre a Média Geométrica e a Média Aritmética, designada por MG-MA. Se  $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ , então

$$\frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} \geq \sqrt[n]{x_1 x_2 \dots x_n}.$$

Com efeito, tendo em conta que  $\sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j|$  é uma soma de  $\frac{n(n-1)}{2}$  termos, e aplicando a desigualdade MG-MA a (3.4) tem-se que

$$\begin{aligned} (\mathcal{E}(G))^2 &= 2m + n(n-1) \left( \frac{1}{\frac{n(n-1)}{2}} \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \right) \\ &\geq 2m + n(n-1) \left( \prod_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \right)^{\frac{2}{n(n-1)}}. \end{aligned}$$

Agora, note-se que

$$\begin{aligned} \prod_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| &= \left| \prod_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j \right| \\ &= |\lambda_1 \lambda_2 \times \lambda_1 \lambda_3 \times \dots \times \lambda_1 \lambda_n \\ &\quad \times \lambda_2 \lambda_3 \times \lambda_2 \lambda_4 \times \dots \times \lambda_2 \lambda_n \\ &\quad \times \dots \\ &\quad \times \lambda_{n-1} \lambda_n| \\ &= \left| \prod_{i=1}^n \lambda_i^{n-1} \right| \\ &= \left| \prod_{i=1}^n \lambda_i \right|^{n-1}. \end{aligned}$$

Consequentemente,

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{E}(G))^2 &\geq 2m + n(n-1) \left( \prod_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \right)^{\frac{2}{n(n-1)}} \\
 &= 2m + n(n-1) \left( \left| \prod_{i=1}^n \lambda_i \right| \right)^{\frac{2}{n(n-1)}(n-1)} \\
 &= 2m + n(n-1) \left| \prod_{i=1}^n \lambda_i \right|^{\frac{2}{n}} \\
 &= 2m + n(n-1) |\det(A)|^{\frac{2}{n}}.
 \end{aligned}$$

Assim,

$$\mathcal{E}(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)} |\det(A)|^{2/n}. \quad (3.6)$$

□

**Corolário 3.1** [25] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$ . Então*

$$\mathcal{E}(G) \leq n\sqrt{n-1}.$$

*Se  $\det(A) \neq 0$ , onde  $A$  é a matriz de adjacência de  $G$ , então*

$$\mathcal{E}(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)} \geq n.$$

**Demonstração.** Suponha-se que  $\det(A) \neq 0$ , então  $m \geq \frac{n}{2}$  (pois caso contrário o grafo  $G$  teria vértices isolados e zero seria um valor próprio de  $A$ ). Uma vez que  $\det(A)$  é necessariamente um inteiro e  $\det(A) \neq 0$ , tem-se que  $|\det(A)| \geq 1$ , logo de (3.6) segue-se

$$\mathcal{E}(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)} \geq \sqrt{2\frac{n}{2} + n(n-1)} = \sqrt{n + n^2 - n} = n.$$

Por outro lado, dado que o número de arestas num grafo com  $n$  vértices não pode ser superior a  $\frac{n(n-1)}{2}$  (número de arestas num grafo completo), tem-se que  $m \leq \frac{n(n-1)}{2}$ . Da Proposição 3.2 tem-se

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{2\frac{n(n-1)}{2}n} = n\sqrt{n-1}.$$

□

**Proposição 3.3** [4] *Seja  $G$  um grafo com  $m$  arestas. Então:*

$$2\sqrt{m} \leq \mathcal{E}(G) \leq 2m. \quad (3.7)$$

*A igualdade  $\mathcal{E}(G) = 2\sqrt{m}$  verifica-se se e só se  $G$  é constituído por um grafo bipartido completo  $K_{n_1, n_2}$  tal que  $n_1 n_2 = m$  e uma quantidade arbitrária de vértices isolados.*

*A igualdade  $\mathcal{E}(G) = 2m$  verifica-se se e só se  $G$  é constituído por  $m$  cópias de  $K_2$  e uma quantidade arbitrária de vértices isolados.*

**Demonstração.** De (3.3) tem-se que

$$\begin{aligned} (\mathcal{E}(G))^2 &= \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \\ &= 2m + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i \lambda_j|. \end{aligned}$$

Logo, pela desigualdade triangular obtém-se

$$(\mathcal{E}(G))^2 \geq 2m + 2 \left| \sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j \right|.$$

Dado que da Proposição 1.2,

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j = -m,$$

então

$$(\mathcal{E}(G))^2 \geq 2m + 2|-m| = 4m,$$

ou seja,

$$2\sqrt{m} \leq \mathcal{E}(G).$$

A igualdade  $\mathcal{E}(G) = 2\sqrt{m}$  verifica-se se e só se a igualdade  $\sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| = \left| \sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j \right| = m$  também se verifica. Logo,  $G$  tem exatamente um valor próprio positivo e exatamente um valor próprio negativo. Por sua vez, isto acontece se e só se uma componente conexa de  $G$  é um grafo bipartido completo (ver Proposição 1.4), e todas as suas outras componentes são vértices isolados, os quais não contribuem para a energia do grafo.

Considere-se, por agora, os grafos com  $m$  arestas e sem vértices isolados. O número máximo de vértices desses grafos é  $2m$ , sendo  $G = mK_2$  o grafo para o qual  $n = 2m$ . Para todos os outros grafos,  $n < 2m$ . Logo, pela Proposição 3.2, tem-se

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{(2m)(2m)} = 2m.$$

Da Proposição 3.2 tem-se que  $G \cong \frac{n}{2}K_2$  se e só se  $\mathcal{E}(G) = \sqrt{2mn}$ . Ou seja,  $G \cong mK_2$  se e só se  $\mathcal{E}(G) = \sqrt{(2m)(2m)} = 2m$ . Claramente, a igualdade  $\mathcal{E}(G) = 2m$  é também satisfeita se, em adição às  $m$  arestas isoladas, o grafo  $G$  contém uma quantidade arbitrária de vértices isolados. Assim, provou-se a proposição.  $\square$

Apresenta-se mais um minorante para a energia de um grafo em termos do seu número de vértices.

**Proposição 3.4** [11] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  sem vértices isolados. Então*

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{n-1},$$

*com igualdade se e só se  $G$  é a estrela  $K_{1,n-1}$ .*

**Demonstração.** Se  $G$  é um grafo conexo, então

$$m \geq n - 1,$$

logo de (3.7), tem-se que

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{m} \geq 2\sqrt{n-1}. \quad (3.8)$$

Suponha-se agora que  $G$  é um grafo não conexo. Sejam  $G_1, G_2, \dots, G_p$  as componentes conexas de  $G$  com  $n_1, n_2, \dots, n_p$  vértices, respetivamente. Então  $n_1 + n_2 + \dots + n_p = n$ .

Sendo  $A(G)$  a matriz de adjacência de  $G$ , uma matriz diagonal por blocos, onde cada bloco diagonal  $A_j$  corresponde à matriz de adjacência da componente conexa  $G_j$ , para  $j = 1, 2, \dots, p$ , pode-se concluir que o conjunto de valores próprios de  $G$  é a união dos conjuntos de valores próprios de cada componente conexa  $G_j$ . Logo, a energia de  $G$  vem dada por:

$$\mathcal{E}(G) = \mathcal{E}(G_1) + \mathcal{E}(G_2) + \dots + \mathcal{E}(G_p).$$

Uma vez que  $\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{n-1}$  quando  $G$  é um grafo conexo, aplica-se este resultado a cada uma das componentes conexas de  $G$ :

$$\mathcal{E}(G_j) \geq 2\sqrt{n_j - 1}, \text{ para todo } j = 1, \dots, p.$$

Dado que  $G$  não tem vértices isolados, então  $n_j \geq 2$ , para cada  $j = 1, \dots, p$ . Logo,

$$2\sqrt{n_j - 1} \geq 2\sqrt{2 - 1} = 2,$$

assim,

$$\sqrt{n_j - 1} \geq 1 \text{ para cada } j = 1, \dots, p.$$

Logo,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &= \mathcal{E}(G_1) + \mathcal{E}(G_2) + \dots + \mathcal{E}(G_p) \\ &\geq 2(\sqrt{n_1 - 1} + \sqrt{n_2 - 1} + \dots + \sqrt{n_p - 1}) \\ &= 2\sqrt{(\sqrt{n_1 - 1} + \sqrt{n_2 - 1} + \dots + \sqrt{n_p - 1})^2} \\ &= 2\sqrt{(n_1 - 1) + (n_2 - 1) + \dots + (n_p - 1) + 2 \sum_{1 \leq j < k \leq p} \sqrt{n_j - 1} \sqrt{n_k - 1}}. \end{aligned}$$

Note-se que na soma

$$\sum_{1 \leq j < k \leq p} \sqrt{n_j - 1} \sqrt{n_k - 1}$$

há  $\frac{p(p-1)}{2}$  parcelas, cada uma maior ou igual a 1, logo

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &\geq 2\sqrt{(n_1 - 1) + (n_2 - 1) + \dots + (n_p - 1) + 2 \sum_{1 \leq j < k \leq p} \sqrt{n_j - 1} \sqrt{n_k - 1}} \\ &\geq 2\sqrt{(n_1 - 1) + (n_2 - 1) + \dots + (n_p - 1) + 2 \frac{p(p-1)}{2}} \\ &= 2\sqrt{n - p + p(p-1)} = 2\sqrt{n - p + p^2 - p + 1 - 1} \\ &= 2\sqrt{n - 1 + (p-1)^2}. \end{aligned}$$

Então

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{n-1+(p-1)^2} \geq 2\sqrt{n-1}. \quad (3.9)$$

Agora prova-se a última parte da Proposição.

Se  $G$  é a estrela  $S_n$ , então por (2.4)  $\mathcal{E}(S_n) = 2\sqrt{n-1}$ .

Reciprocamente, suponha-se que a igualdade  $\mathcal{E}(G) = 2\sqrt{n-1}$  se verifica. Logo, de (3.9) tem-se

$$2\sqrt{n-1+(p-1)^2} = 2\sqrt{n-1}$$

$$\Leftrightarrow (p-1)^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow p = 1.$$

Consequentemente,  $G$  é um grafo conexo dado que  $p$  corresponde ao número de componentes conexas de  $G$ . Também de (3.8) tem-se

$$2\sqrt{m} = 2\sqrt{n-1}$$

$$\Leftrightarrow m = n-1.$$

Assim,  $\mathcal{E}(G) = 2\sqrt{m}$ . Consequentemente, pela Proposição 3.3,  $G$  é o grafo bipartido completo  $K_{n_1, n_2}$  tal que  $n_1 n_2 = n-1$ , logo  $n_1 = \frac{n-1}{n_2}$ . Dado que  $n = n_1 + n_2$ , tem-se

$$n = \frac{n-1}{n_2} + n_2$$

$$\Leftrightarrow n_2 n = n-1 + n_2^2$$

$$\Leftrightarrow n_2(n - n_2) = n-1.$$

Dado que  $n$  e  $n_2$  são números inteiros, pode-se afirmar que  $n_2 = 1$  (ou  $n_2 = n-1$ ). Logo,  $n_1 = n-1$  (ou  $n_1 = 1$ ). Consequentemente,  $G$  é a estrela  $K_{n-1, 1} \cong K_{1, n-1}$ .  $\square$

A importância do minorante apresentado na Proposição 3.4 está no facto de revelar que a estrela  $S_n$  tem a menor energia entre os grafos com  $n$  vértices e sem vértices isolados.

**Definição 3.1** [24] *Seja  $G = (V(G), E(G))$  um grafo  $k$ -regular não completo com  $n > 1$  vértices.  $G$  é fortemente regular com parâmetros  $(n, k, \psi, \mu)$  se  $\psi, \mu$  são inteiros não negativos tais que:*

- *Cada par de vértices adjacentes tem  $\psi$  vizinhos em comum.*
- *Cada par de vértices não adjacentes tem  $\mu$  vizinhos em comum.*

**Exemplo 3.1** *O grafo de Petersen é um grafo fortemente regular com parâmetros  $(10, 3, 0, 1)$ .*

**Exemplo 3.2** *O grafo fortemente regular com parâmetros  $(n = 4t + 1, 2t, t - 1, t)$  para algum inteiro  $t \geq 1$ , é chamado grafo Conferência, e é denotado por  $Cf_n$ .*



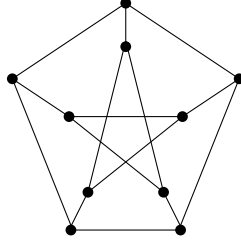


Figura 3.1: Grafo de Petersen

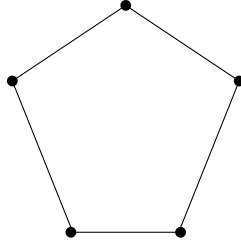


Figura 3.2: Grafo  $Cf_5$

Dado um grafo  $G$  fortemente regular com parâmetros  $(n, k, \psi, \mu)$ , se  $\mu = 0$ , então  $G$  é a união disjunta de grafos completos, enquanto que, se  $\mu \geq 1$  e  $G$  não é o grafo completo, então os valores próprios de  $G$  são  $k$  (valor próprio trivial) e as raízes  $r, s$  da equação quadrática

$$x^2 + (\mu - \psi)x + (\mu - k) = 0. \quad (3.10)$$

O valor próprio  $k$  tem multiplicidade 1, e as multiplicidades  $m_r$  de  $r$  e  $m_s$  de  $s$ , podem calcular-se a partir do sistema de equações:

$$\begin{aligned} m_r + m_s &= n - 1 \\ k + m_r r + m_s s &= 0, \end{aligned}$$

(para mais detalhes ver [2, 24]).

A seguir determinam-se dois majorantes para  $\mathcal{E}(G)$  chamados majorantes de Koolen-Moulton [19].

**Teorema 3.1** [19] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  tal que  $2m \geq n$  e  $n > 1$ . Então,*

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)}. \quad (3.11)$$

Além disso, a igualdade é obtida em (3.11) se e só se  $G$  for o grafo  $\frac{n}{2}K_2$ , ou  $K_n$ , ou um grafo conexo fortemente regular com dois valores próprios não triviais, ambos com valores absolutos iguais a

$$\sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}}.$$

**Demonstração.** Suponha-se que  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$  são os valores próprios de  $G$  (os quais são reais dado que a matriz de adjacência  $A(G)$  é simétrica).

Aplicando o princípio de Rayleigh à matriz  $A(G)$ , tem-se que para  $\mathbf{x} \neq 0$

$$\lambda_n \leq \frac{\mathbf{x}^T A(G) \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} \leq \lambda_1.$$

Em particular, para  $\mathbf{x} = [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$  tem-se

$$\frac{2m}{n} \leq \lambda_1. \quad (3.12)$$

Por outro lado, de acordo com (1.2)

$$0 < \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m,$$

logo,

$$0 < \sum_{i=2}^n \lambda_i^2 = 2m - \lambda_1^2. \quad (3.13)$$

Pela desigualdade de Cauchy Schwarz aplicada aos vetores  $[|\lambda_2| \ |\lambda_3| \ \dots \ |\lambda_n|]^T$  e  $[1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$ , ambos com  $n - 1$  entradas, tem-se que

$$\mathcal{E}(G) - |\lambda_1| = \mathcal{E}(G) - \lambda_1 = \sum_{i=2}^n |\lambda_i| = [|\lambda_2| \ |\lambda_3| \ \dots \ |\lambda_n|] \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \leq \sqrt{\sum_{i=2}^n \lambda_i^2} \sqrt{n-1}. \quad (3.14)$$

De (3.13) e (3.14) tem-se

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{2m - \lambda_1^2} \sqrt{n-1}. \quad (3.15)$$

Analisando o segundo membro desta desigualdade e considerando a função

$$f(x) = x + \sqrt{(n-1)(2m - x^2)}, \quad (3.16)$$

com  $x \in ]0, \sqrt{2m}[$ , (atendendo a que  $0 < \lambda_1 < \sqrt{2m}$ , ver (3.13)), obtém-se

$$\begin{aligned} f'(x) &= 1 - \frac{1}{2\sqrt{2m - x^2}} 2x\sqrt{n-1} \\ &= \frac{\sqrt{2m - x^2} - x\sqrt{n-1}}{\sqrt{2m - x^2}}. \end{aligned}$$

Note-se que  $f'(x) < 0$  se e só se

$$\sqrt{2m - x^2} - x\sqrt{n-1} < 0$$

$$\begin{aligned} &\Leftrightarrow \sqrt{2m - x^2} < x\sqrt{n-1} \\ &\Leftrightarrow 2m - x^2 < x^2(n-1) \\ &\Leftrightarrow \sqrt{\frac{2m}{n}} < x. \end{aligned}$$

Então,  $f'(x) < 0$  no intervalo  $\left[\sqrt{\frac{2m}{n}}, \sqrt{2m}\right]$ . Assim a função  $f(x)$  é decrescente no intervalo  $\left[\sqrt{\frac{2m}{n}}, \sqrt{2m}\right]$ . Uma vez que  $\sqrt{\frac{2m}{n}} \leq \frac{2m}{n} \leq \lambda_1 < \sqrt{2m}$  (ver 3.12 e 3.13), tem-se

$$f(\lambda_1) \leq f\left(\frac{2m}{n}\right),$$

isto é,

$$\lambda_1 + \sqrt{2m - \lambda_1^2}\sqrt{n-1} \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}\sqrt{n-1}. \quad (3.17)$$

De (3.15) e (3.17) obtém-se

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}\sqrt{n-1}.$$

Agora prova-se a última parte do teorema.

Considere-se o grafo  $K_n$ . Claramente  $m = \frac{n(n-1)}{2}$ . Logo,

$$\begin{aligned} \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left(2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2\right)} &= n-1 + \sqrt{(n-1)(n(n-1) - (n-1)^2)} \\ &= n-1 + \sqrt{(n-1)(n^2 - n - n^2 + 2n - 1)} \\ &= n-1 + n-1 \\ &= 2n-2 \\ &= \mathcal{E}(K_n), \end{aligned}$$

de acordo com (2.1).

Considere-se agora o grafo  $\frac{n}{2}K_2$ . Uma vez que o número de arestas de  $\frac{n}{2}K_2$  é igual a  $m = \frac{n}{2}$ , tem-se

$$\frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left(2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2\right)} = 1 + \sqrt{(n-1)(n-1)} = n = \mathcal{E}\left(\frac{n}{2}K_2\right),$$

de acordo com (2.2).

Considere-se ainda  $G$  um grafo conexo fortemente regular, com parâmetros  $(n, k, \psi, \mu)$ , e dois valores próprios não triviais, ambos com valores absolutos iguais a  $\sqrt{\frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1}}$ . Pela

Observação 1.1, a soma dos graus dos vértices de  $G$ ,  $nk$ , é igual ao dobro do número de arestas, logo  $k = \frac{2m}{n}$  é o valor próprio trivial. Assim,

$$\begin{aligned} \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)} &= \frac{2m}{n} + (n-1) \sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}} \\ &= k + (n-1) \sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}} \\ &= \mathcal{E}(G). \end{aligned}$$

Assim, mostrou-se que se  $G$  é  $K_2$ ,  $\frac{n}{2}K_2$  ou um grafo conexo fortemente regular com dois valores próprios não triviais, ambos com valores absolutos iguais a  $\sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}}$  então a igualdade (3.11) verifica-se.

Reciprocamente, suponha-se que a igualdade (3.11) se verifica. De (3.15) e (3.17) obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)} &= \mathcal{E}(G) \\ &\leq \lambda_1 + \sqrt{2m - \lambda_1^2} \sqrt{n-1} \\ &\leq \frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2} \sqrt{n-1}, \end{aligned}$$

logo,

$$\begin{aligned} \lambda_1 + \sqrt{2m - \lambda_1^2} \sqrt{n-1} &= \frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2} \sqrt{n-1} \\ \Leftrightarrow \left( \lambda_1 - \frac{2m}{n} \right) + \sqrt{n-1} \left( \sqrt{2m - \lambda_1^2} - \sqrt{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2} \right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \lambda_1 &= \frac{2m}{n}. \end{aligned}$$

Do Lema 1.1 e da Proposição 1.1, tem-se

$$n \frac{2m}{n} = 2m = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2.$$

Assim,  $G$  é regular de grau  $\frac{2m}{n}$ .

Por outro lado, a igualdade (3.11) verifica-se se e só se a desigualdade de Cauchy Schwarz (3.14) se verifica na forma de igualdade. Porém, sabe-se que esta igualdade se

verifica se e só se os vetores  $[|\lambda_2| \ |\lambda_3| \ \dots \ |\lambda_n|]^T$  e  $[1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$ , ambos com  $n - 1$  entradas, são linearmente dependentes, isto é, se e só se  $|\lambda_2| = |\lambda_3| = \dots = |\lambda_n|$ .

Assim, de acordo com (3.14)

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^n |\lambda_i| &= \sqrt{\sum_{i=2}^n \lambda_i^2} \sqrt{n-1} \\ &= \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)} \\ &= \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)} \\ \Leftrightarrow (n-1) |\lambda_i| &= \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)} \text{ para } i = 2, 3, \dots, n. \\ \Leftrightarrow |\lambda_i| &= \sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}} \text{ para } i = 2, 3, \dots, n. \end{aligned}$$

Concluindo, se  $G$  satisfaz a igualdade

$$\mathcal{E}(G) = \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)},$$

então  $G$  é um grafo regular de grau  $\frac{2m}{n}$ , cujos valores próprios são tais que  $\lambda_1 = \frac{2m}{n}$  e  $|\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}}$  para  $i = 2, 3, \dots, n$ , ou seja,  $\lambda_i = \sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}}$  ou  $\lambda_i = -\sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}}$  para  $i = 2, 3, \dots, n$ .

Assim, têm-se as seguintes possibilidades:

1. O grafo  $G$  tem todos os valores próprios com o mesmo valor absoluto, então

$$\frac{2m}{n} = \sqrt{\frac{2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-1}}$$

$$\begin{aligned}
 &\Leftrightarrow \frac{2m}{n} = \frac{\sqrt{(n-1)\left(2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2\right)}}{n-1} \\
 &\Leftrightarrow \left(\frac{2m(n-1)}{n}\right)^2 = (n-1)\left(2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2\right) \\
 &\Leftrightarrow \frac{(2m(n-1))^2}{n^2} = 2m(n-1) - (n-1)\left(\frac{2m}{n}\right)^2 \\
 &\Leftrightarrow 2m(n-1) = n^2 - 2m \\
 &\Leftrightarrow 2mn = n^2 \\
 &\Leftrightarrow m = \frac{n}{2}.
 \end{aligned}$$

Assim, neste caso,  $G$  é um grafo regular de grau  $\frac{2m}{n} = 1$ . Sabe-se que cada componente conexa de um grafo regular  $G$  de grau 1 é isomorfa com o grafo  $K_2$  (ver [6, pag. 72]), e dado que  $G$  tem  $m = \frac{n}{2}$  arestas,  $G$  é o grafo  $\frac{n}{2}K_2$  cujos valores próprios são 1 e  $-1$ , ambos com multiplicidade  $\frac{n}{2}$ . Note-se que estes valores próprios satisfazem

$$\lambda_1 = \frac{2m}{n} = 1, |\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1}} = 1 \text{ para } i = 2, 3, \dots, n.$$

2. O grafo  $G$  não tem todos os valores próprios com o mesmo valor absoluto.

(a) O grafo  $G$  tem dois valores próprios distintos. Logo, os valores próprios distintos

são  $\frac{2m}{n}$  e  $-\sqrt{\frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1}}$ , (atendendo a que  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$ ). Assim, tem-se

$$\frac{2m}{n} + (n-1) \left( -\sqrt{\frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1}} \right) = 0$$

$$\begin{aligned}
 &\Leftrightarrow \frac{2m}{n} = (n-1) \left( \sqrt{\frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1}} \right) \\
 &\Leftrightarrow \frac{(2m)^2}{n^2(n-1)^2} = \frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1} \\
 &\Leftrightarrow \frac{(2m)^2}{n^2(n-1)} = 2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2 \\
 &\Leftrightarrow 2m = n^2(n-1) - 2m(n-1) \\
 &\Leftrightarrow n(n^2 - n - 2m) = 0 \\
 &\Leftrightarrow n(n-1) = 2m \\
 &\Leftrightarrow m = \frac{n(n-1)}{2}.
 \end{aligned}$$

Assim,  $G$  é um grafo regular de grau  $\frac{2m}{n} = n - 1$  com  $m = \frac{n(n-1)}{2}$  arestas. Consequentemente,  $G$  é o grafo  $K_n$ , cujos valores próprios são  $n - 1$  com multiplicidade 1 e  $-1$  com multiplicidade  $n - 1$ . Note-se que estes valores próprios satisfazem  $\lambda_1 = \frac{2m}{n} = n - 1$  e  $|\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{n(n-1) - (n-1)^2}{n-1}} = 1$  para  $i = 2, 3, \dots, n$ .

(b) O grafo  $G$  tem três valores próprios distintos.

Logo, os valores próprios distintos são  $\frac{2m}{n}$ ,  $\sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}}$  e  $-\sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}}$ .

Sabe-se que um grafo conexo regular é fortemente regular se e só se tem exatamente três valores próprios distintos (ver [6, pag. 103]). Consequentemente,  $G$  é fortemente regular com valores próprios  $\frac{2m}{n}$  (valor próprio trivial) e as raízes da equação quadrática

$$x^2 + (\mu - \psi)x + (\mu - k) = 0. \quad (3.18)$$

Uma vez que as raízes não triviais são  $\sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}}$  e  $-\sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}}$ , então

$$\begin{aligned} & \left( x - \sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}} \right) \left( x + \sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}} \right) = 0 \\ \Leftrightarrow & x^2 - \left( \frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1} \right) = 0 \\ \Leftrightarrow & x^2 + \left( \frac{(2m)^2 - 2mn^2}{n^2(n-1)} \right) = 0 \\ \Leftrightarrow & x^2 + \left( \frac{(2m)^2 - 2mn - 2mn(n-1)}{n^2(n-1)} \right) = 0 \\ \Leftrightarrow & x^2 + \left( \frac{2m(2m-n)}{n^2(n-1)} - \frac{2m}{n} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Tendo em conta (3.18) e (3.19), pode-se concluir que  $G$  é um grafo fortemente regular com parâmetros.

$$\left( n, k = \frac{2m}{n}, \psi = \frac{2m(2m-n)}{n^2(n-1)}, \mu = \frac{2m(2m-n)}{n^2(n-1)} \right). \quad (3.20)$$

□

**Observação 3.1** De acordo com [19], o majorante do Teorema 3.1 é melhor do que o majorante da Proposição 3.2, isto é

$$\frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-1} \leq \sqrt{2mn}. \quad (3.21)$$

Com efeito, dado que a função definida em (3.16),

$$f(x) = x + \sqrt{2m - x^2} \sqrt{n-1},$$

é decrescente no intervalo  $\left] \sqrt{\frac{2m}{n}}, \sqrt{2m} \right]$ , e uma vez que  $\sqrt{\frac{2m}{n}} \leq \frac{2m}{n}$ , tem-se

$$f\left(\frac{2m}{n}\right) \leq f\left(\sqrt{\frac{2m}{n}}\right).$$

Assim,

$$\begin{aligned} f\left(\frac{2m}{n}\right) &= \frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-1} \\ &\leq \sqrt{\frac{2m}{n}} + \sqrt{2m - \left(\sqrt{\frac{2m}{n}}\right)^2} \sqrt{n-1} = f\left(\sqrt{\frac{2m}{n}}\right) \\ &= \sqrt{\frac{2m}{n}} + \sqrt{\left(2m - \frac{2m}{n}\right)(n-1)} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{n}} + \sqrt{\frac{2m}{n}(n-1)^2} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{n}}(1 + n - 1) \\ &= \sqrt{2mn}. \end{aligned}$$

A igualdade é obtida em (3.21) se e só se  $2m = n$ .

A próxima proposição apresenta mais um majorante para a energia de um grafo, bem com o tipo de grafos para os quais este majorante é atingido.

**Proposição 3.5** [19] Seja  $G$  um grafo com  $n > 1$  vértices. Então,

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{n}{2} (1 + \sqrt{n}), \quad (3.22)$$

com igualdade se e só se  $G$  é um grafo fortemente regular com parâmetros  $\left(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}\right)$ .



**Demonstração.** Suponha-se que  $G$  é um grafo- $(n, m)$  com  $n > 1$ .

De acordo com a Proposição 3.3,  $2m \geq \mathcal{E}(G)$ . Por outro lado, dado que  $\sqrt{n} \geq 1$ , obtém-se

$$n\sqrt{n} \geq n$$

$$\begin{aligned} &\Leftrightarrow n + n\sqrt{n} \geq 2n \\ &\Leftrightarrow \frac{n}{2} (1 + \sqrt{n}) \geq n. \end{aligned}$$

Se  $n \geq 2m$ , então

$$\frac{n}{2} (1 + \sqrt{n}) \geq \mathcal{E}(G).$$

Suponha-se agora que  $n \leq 2m$ , então pelo Teorema 3.1,

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)}. \quad (3.23)$$

Considere-se a função

$$g(x) = \frac{2x}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2 \right)},$$

com  $n \leq 2x$  e  $n^2 > 2x$  (atendendo a que interessa considerar  $x = m$ ). Assim,

$$\begin{aligned} g'(x) &= \frac{2}{n} + \sqrt{(n-1)} \frac{2 - 2 \left( \frac{2x}{n} \right) \frac{2}{n}}{2\sqrt{2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2}} \\ &= \frac{2}{n} + \frac{1 - \left( \frac{2}{n} \right)^2 x}{2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2} \sqrt{(n-1) \left( 2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2 \right)} \\ &= \frac{2 \left( 2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2 \right) + n \left( 1 - \left( \frac{2}{n} \right)^2 x \right) \sqrt{(n-1) \left( 2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2 \right)}}{n \left( 2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2 \right)} \\ &= \frac{4x - \frac{8x^2}{n^2} + n \left( 1 - \left( \frac{2}{n} \right)^2 x \right) \sqrt{2x(n-1) \left( 1 - \frac{2x}{n^2} \right)}}{2xn \left( 1 - \frac{2x}{n^2} \right)}. \end{aligned}$$

Note-se que  $2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2 > 0$  uma vez que  $n^2 > 2x$ .

A seguir, analise-se o numerador de  $g'(x)$  para  $x = \frac{n^2+n\sqrt{n}}{4}$ . Com efeito,

$$\begin{aligned}
 & 4 \left( \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4} \right) - \frac{8 \left( \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4} \right)^2}{n^2} \\
 & + n \left[ 1 - \left( \frac{2}{n} \right)^2 \left( \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4} \right) \right] \sqrt{2 \left( \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4} \right) (n-1) \left( 1 - \frac{2 \left( \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4} \right)}{n^2} \right)} \\
 = & n^2 + n\sqrt{n} - \frac{n^2 \frac{(n+\sqrt{n})^2}{2}}{n^2} + n \left( 1 - \frac{n + \sqrt{n}}{n} \right) \sqrt{n \frac{n + \sqrt{n}}{2} (n-1) \left( 1 - \frac{n + \sqrt{n}}{2n} \right)} \\
 = & n^2 + n\sqrt{n} - \frac{n^2 + 2n\sqrt{n} + n}{2} - \sqrt{n} \sqrt{\frac{n + \sqrt{n}}{2} (n-1) \left( \frac{n - \sqrt{n}}{2} \right)} \\
 = & \frac{2n^2 + 2n\sqrt{n} - n^2 - 2n\sqrt{n} - n}{2} - \frac{\sqrt{n}}{2} \sqrt{(n-1)(n^2 - n)} \\
 = & \frac{n^2 - n - n(n-1)}{2} \\
 = & 0.
 \end{aligned}$$

Assim,  $\frac{n^2+n\sqrt{n}}{4}$  é um ponto crítico da função  $g(x)$ . Por outro lado, dado que

$$g'(x) = \frac{2}{n} + \sqrt{(n-1)} \frac{1 - \left( \frac{2x}{n} \right) \frac{2}{n}}{\sqrt{2x - \left( \frac{2x}{n} \right)^2}},$$

tem-se que

$$\begin{aligned}
 g''(x) &= \sqrt{(n-1)} \frac{\left(-\left(\frac{2}{n}\right)^2\right) \sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2} - \left(1 - \left(\frac{2x}{n}\right) \frac{2}{n}\right) \left(\frac{2-2\left(\frac{2x}{n}\right)\frac{2}{n}}{2\sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2}}\right)}{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2} \\
 &= -\frac{\sqrt{(n-1)}}{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2} \left[ \left(\frac{2}{n}\right)^2 \sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2} + \frac{\left(1 - \left(\frac{2x}{n}\right) \frac{2}{n}\right)^2}{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2} \sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2} \right] \\
 &= -\frac{\sqrt{(n-1)} \sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2}}{\left(2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2\right)^2} \left[ \left(\frac{2}{n}\right)^2 \left(2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2\right) + \left(1 - \left(\frac{2x}{n}\right) \frac{2}{n}\right)^2 \right] \\
 &= -\frac{\sqrt{(n-1)} \sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2}}{\left(2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2\right)^2} \left[ \frac{8x}{n^2} - \left(\frac{2}{n}\right)^4 x^2 + 1 - \frac{8x}{n^2} + \left(\frac{2}{n}\right)^4 x^2 \right] \\
 &= -\frac{\sqrt{(n-1)} \sqrt{2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2}}{\left(2x - \left(\frac{2x}{n}\right)^2\right)^2} \\
 &< 0.
 \end{aligned}$$

Logo, a função  $g(x)$  atinge o seu máximo valor quando

$$x = \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4}.$$

Então, de (3.23) tem-se que

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(G) &\leq \frac{2m}{n} + \sqrt{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-1} \\
 &= g(m) \\
 &\leq g\left(\frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4}\right) \\
 &= \frac{2}{n} \left(\frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4}\right) + \sqrt{2 \left(\frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4}\right) - \left(\frac{2}{n} \left(\frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4}\right)\right)^2} \sqrt{n-1} \\
 &= \frac{n + \sqrt{n}}{2} + \sqrt{\frac{n^2 + n\sqrt{n}}{2} - \left(\frac{n + \sqrt{n}}{2}\right)^2} \sqrt{n-1} \\
 &= \frac{n + \sqrt{n}}{2} + \sqrt{\frac{2n^2 + 2n\sqrt{n} - n^2 - 2n\sqrt{n} - n}{4}} \sqrt{n-1} \\
 &= \frac{n + \sqrt{n}}{2} + \frac{(n-1)\sqrt{n}}{2} \\
 &= \frac{n}{2} (1 + \sqrt{n}).
 \end{aligned}$$

Agora prova-se a última parte da proposição. Suponha-se que  $G$  é um grafo fortemente regular com parâmetros  $\left(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}\right)$ . Os valores próprios de  $G$  são  $k = \frac{n+\sqrt{n}}{2}$  (com multiplicidade 1) e as raízes da equação quadrática

$$\begin{aligned} x^2 + \left(\frac{n+2\sqrt{n}}{4} - \frac{n+2\sqrt{n}}{4}\right)x + \left(\frac{n+2\sqrt{n}}{4} - \frac{n+\sqrt{n}}{2}\right) &= 0 \\ x^2 + \left(\frac{n+2\sqrt{n}-2n-2\sqrt{n}}{4}\right) &= 0 \\ x^2 + \left(\frac{-n}{4}\right) &= 0. \end{aligned}$$

Assim, a energia de  $G$  vem dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &= \frac{n+\sqrt{n}}{2} + (n-1) \left(\frac{\sqrt{n}}{2}\right) \\ &= \frac{n+\sqrt{n}+n\sqrt{n}-\sqrt{n}}{2} \\ &= \frac{n}{2} (1+\sqrt{n}). \end{aligned}$$

Reciprocamente, suponha-se que

$$\mathcal{E}(G) = \frac{n}{2} (1+\sqrt{n}).$$

Logo,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &= \frac{n+\sqrt{n}+n\sqrt{n}-\sqrt{n}}{2} \\ &= \frac{n+\sqrt{n}}{2} + \sqrt{\frac{(n-1)(n^2-n)}{4}} \\ &= \frac{n+\sqrt{n}}{2} + \sqrt{(n-1) \left(\frac{n+\sqrt{n}}{2}\right) \left(\frac{2n-n-\sqrt{n}}{2}\right)} \\ &= \frac{n+\sqrt{n}}{2} + \sqrt{(n-1) \left(\frac{n+\sqrt{n}}{2}\right) \left(n - \frac{n+\sqrt{n}}{2}\right)} \\ &= \frac{n+\sqrt{n}}{2} + \sqrt{(n-1) \left[ n \left(\frac{n+\sqrt{n}}{2}\right) - \left(\frac{n+\sqrt{n}}{2}\right)^2 \right]}. \end{aligned} \tag{3.24}$$

Note-se que na demonstração do Teorema 3.1, com  $\frac{2m}{n} = \frac{n+\sqrt{n}}{2} \geq 1$ , a igualdade (3.24) era satisfeita quando  $G$  é um grafo regular de grau  $\frac{n+\sqrt{n}}{2}$ , cujos valores próprios são tais que

$$\lambda_1 = \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \text{ e}$$

$$\begin{aligned} |\lambda_i| &= \sqrt{\frac{2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-1}} \\ &= \sqrt{\frac{n\left(\frac{n+\sqrt{n}}{2}\right) - \left(\frac{n+\sqrt{n}}{2}\right)^2}{n-1}} \\ &= \sqrt{\frac{n^2 - n}{4(n-1)}} \\ &= \frac{\sqrt{n}}{2}, \end{aligned}$$

para  $i = 2, 3, \dots, n$ .

Dos três grafos possíveis no Teorema 3.1, o único que satisfaz estas condições nos valores próprios é o grafo conexo fortemente regular com parâmetros  $(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \psi, \mu)$  e valores próprios iguais a  $\lambda_1 = \frac{n+\sqrt{n}}{2}$  (valor próprio trivial),  $\lambda_2 = \frac{\sqrt{n}}{2}$  e  $\lambda_3 = -\frac{\sqrt{n}}{2}$ .

Os parâmetros  $\psi$  e  $\mu$  podem ser obtidos de (3.20) considerando  $\frac{2m}{n} = \frac{n+\sqrt{n}}{2}$ , tal como a seguir se indica.

$$\begin{aligned} \mu &= \psi = \frac{2m(2m-n)}{n^2(n-1)} \\ &= \frac{n\frac{n+\sqrt{n}}{2}\left(n\frac{n+\sqrt{n}}{2} - n\right)}{n^2(n-1)} \\ &= \frac{n^2(n+\sqrt{n})(n+\sqrt{n}-2)}{4n^2(n-1)} \\ &= \frac{n^2 + 2n\sqrt{n} - n - 2\sqrt{n}}{4(n-1)} \\ &= \frac{n(n-1) + 2\sqrt{n}(n-1)}{4(n-1)} \\ &= \frac{n + 2\sqrt{n}}{4}. \end{aligned}$$

Consequentemente,  $G$  é um grafo fortemente regular com parâmetros  $\left(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}\right)$ . □

Antes de introduzir a próxima proposição, relembra-se a definição de um *design*  $2 - (v, k, \tau)$ .

**Definição 3.2** [5] (*Design*  $2 - (v, k, \tau)$ ). *Dados os inteiros positivos  $k, v$  e  $\tau$  tais que  $2 < k < v$ , o par  $(X, \mathcal{B})$  diz-se um design  $2 - (v, k, \tau)$ , se  $X$  é um conjunto de cardinalidade  $v$  e  $\mathcal{B}$  é uma coleção de  $k$ -subconjuntos de  $X$ , designados por blocos, onde quaisquer 2 elementos de  $X$  estão contidos em exactamente  $\tau$  blocos.*

Quando  $|\mathcal{B}| = b = v$ , ou seja, quando o número de blocos é igual à cardinalidade de  $X$ , diz-se que o *design*  $2 - (v, k, \tau)$  é *simétrico*. De modo equivalente, também se pode afirmar que o *design*  $2 - (v, k, \tau)$  é *simétrico*, se  $k = r$ , onde  $r$  denota o número de blocos que contém um elemento  $x \in X$ .

Se  $(X, \mathcal{B})$  é um *design*  $2 - (v, k, \tau)$ , então

$$r = \tau \frac{v-1}{k-1}$$

$$\Leftrightarrow rk = \tau(v-1) + r, \quad (3.25)$$

(para mais detalhes, ver [5, páginas 241-243]).

A *matriz de incidência*  $C$  de um *design*  $2 - (v, k, \tau)$  é uma matriz de ordem  $v \times b$ , tal que para cada  $x_i \in X$ , e cada bloco  $B_j$  de  $\mathcal{B}$ , a entrada  $(i, j)$  é igual a 1 se  $x_i \in B_j$  e igual a 0 no caso contrário. O *grafo de incidência* de um *design* é definido pelo grafo  $G$  com matriz de adjacência

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & C \\ C^T & 0 \end{bmatrix},$$

ou seja, é tal que o conjunto dos vértices de  $G$  é formado pela reunião do conjunto de elementos de  $X$  com os elementos que constituem os blocos de  $\mathcal{B}$ , e um vértice  $x \in X$  está ligado a um vértice  $B \in \mathcal{B}$  se  $x \in B$ .

O *grafo de incidência* de um *design simétrico*  $2 - (v, k, \tau)$  com  $v > k > \tau > 0$  tem valores próprios iguais a  $k$ ,  $\sqrt{k-\tau}$  (com multiplicidade  $v-1$ ),  $-\sqrt{k-\tau}$  (com multiplicidade  $v-1$ ), e  $-k$ . Com efeito, seja

$$A = \begin{bmatrix} 0 & C \\ C^T & 0 \end{bmatrix}$$

a matriz de adjacência do grafo de incidência de um *design simétrico*  $2 - (v, k, \tau)$  com  $v > k > \tau > 0$ . Dado que

$$A^2 = \begin{bmatrix} CC^T & 0 \\ 0 & C^T C \end{bmatrix},$$

os valores próprios de  $A$  são as raízes quadradas dos valores próprios de  $CC^T$  ou  $C^T C$  (que coincidem exceto no número de zeros). A matriz quadrada  $CC^T$  tem a forma (ver [5, pag. 242])

$$CC^T = \begin{bmatrix} k & \tau & \cdots & \tau \\ \tau & k & \cdots & \tau \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau & \tau & \cdots & k \end{bmatrix}.$$

Logo, o polinómio característico de  $CC^T$  vem dado por

$$\begin{aligned}
 \phi_{CC^T}(x) &= \det(xI - CC^T) \\
 &= \begin{vmatrix} x-k & -\tau & \cdots & -\tau \\ -\tau & x-k & \cdots & -\tau \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\tau & -\tau & \cdots & x-k \end{vmatrix} \\
 &= \begin{vmatrix} x-k+(v-1)(-\tau) & x-k+(v-1)(-\tau) & \cdots & x-k+(v-1)(-\tau) \\ & -\tau & & x-k \\ & \vdots & & \vdots \\ & -\tau & & -\tau \end{vmatrix} \quad (3.26)
 \end{aligned}$$

$$= (x-k+(v-1)(-\tau)) \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & x-k+\tau & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & x-k+\tau \end{vmatrix} \quad (3.27)$$

$$= (x - (k + \tau(v-1))) (x - k + \tau)^{v-1}. \quad (3.28)$$

A igualdade (3.26) obtém-se adicionando à primeira linha todas as outras, a igualdade (3.27) obtém-se adicionando  $\tau$  vezes a primeira linha a todas as outras, depois de se colocar em evidência  $(x - k + (v-1)(-\tau))$  e, finalmente, a igualdade (3.28) decorre do cálculo do determinante da matriz triangular superior. Por outro lado, considerando  $r = k$  em (3.25), obtém-se

$$k^2 = \tau(v-1) + k.$$

Logo,

$$\det(xI - CC^T) = (x - k^2)(x - k + \tau)^{v-1}.$$

Consequentemente, os valores próprios de  $A$  são  $k$ ,  $\sqrt{k - \tau}$  (com multiplicidade  $v-1$ ),  $-\sqrt{k - \tau}$  (com multiplicidade  $v-1$ ), e  $-k$ .

**Proposição 3.6** [20] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  bipartido tal que  $n > 2$  e  $m \geq \frac{n}{2}$ . Então*

$$\mathcal{E}(G) \leq 2 \left( \frac{2m}{n} \right) + \sqrt{(n-2) \left( 2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)}. \quad (3.29)$$

Além disso, a igualdade é obtida em (3.29) se e só se alguma das seguintes afirmações é verdadeira:

1.  $n = 2m$  e  $G \cong mK_2$ ;
2.  $n = 2t$ ,  $m = t^2$  e  $G \cong K_{t,t}$ ;

3.  $n = 2v$ ,  $2\sqrt{m} < n < 2m$ , e  $G$  é o grafo de incidência de um design simétrico  $2 - (v, k, \tau)$  com  $k = \frac{2m}{n}$  e  $\tau = \frac{k(k-1)}{v-1}$ .

**Demonstração.** Suponha-se que  $G$  é um grafo bipartido. De acordo com a Proposição 1.3, se  $\lambda > 0$  é um valor próprio de  $G$  então  $-\lambda$  também é. Consequentemente,

$$0 < \sum_{i=2}^{n-1} \lambda_i^2 = 2m - 2\lambda_1^2. \quad (3.30)$$

Pela desigualdade de Cauchy Schwarz aplicada aos vetores  $[|\lambda_2| \ |\lambda_3| \ \dots \ |\lambda_{n-1}|]^T$  e  $[1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$ , ambos com  $n-2$  entradas, tem-se que

$$\mathcal{E}(G) - 2|\lambda_1| = \mathcal{E}(G) - 2\lambda_1 = \sum_{i=2}^{n-1} |\lambda_i| = [|\lambda_2| \ |\lambda_3| \ \dots \ |\lambda_{n-1}|] \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \leq \sqrt{\sum_{i=2}^{n-1} \lambda_i^2} \sqrt{n-2}. \quad (3.31)$$

De (3.30) e (3.31) segue-se,

$$\mathcal{E}(G) \leq 2\lambda_1 + \sqrt{2m - 2\lambda_1^2} \sqrt{n-2}. \quad (3.32)$$

Analisando o segundo membro desta desigualdade e considerando a função

$$h(x) = 2x + \sqrt{2m - 2x^2} \sqrt{n-2},$$

com  $x \in ]0, \sqrt{m}[$  (atendendo a que  $0 < \lambda_1 < \sqrt{m}$ , ver (3.30)), obtém-se

$$\begin{aligned} h'(x) &= 2 - \frac{4x}{2\sqrt{2m - 2x^2}} \sqrt{n-2} \\ &= \frac{2\sqrt{2m - 2x^2} - 2x\sqrt{n-2}}{\sqrt{2m - 2x^2}}. \end{aligned}$$

Note-se que  $h'(x) < 0$  se e só se

$$2\sqrt{2m - 2x^2} - 2x\sqrt{n-2} < 0$$

$$\Leftrightarrow 2\sqrt{2m - 2x^2} < 2x\sqrt{n-2}$$

$$\Leftrightarrow 2m - 2x^2 < x^2(n-2)$$

$$\Leftrightarrow 2m < 2x^2 + nx^2 - 2x^2$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{2m}{n}} < x.$$



Então  $h'(x) < 0$  no intervalo  $\left] \sqrt{\frac{2m}{n}}, \sqrt{m} \right[$ . Assim a função  $h(x)$  é decrescente no intervalo  $\left] \sqrt{\frac{2m}{n}}, \sqrt{m} \right[$ . Uma vez que  $\sqrt{\frac{2m}{n}} \leq \frac{2m}{n} \leq \lambda_1 \leq \sqrt{m}$  (ver 3.12 e 3.30) tem-se

$$h(\lambda_1) \leq h\left(\frac{2m}{n}\right),$$

isto é,

$$h(\lambda_1) = 2\lambda_1 + \sqrt{2m - 2\lambda_1^2} \sqrt{n-2} \leq 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-2} = h\left(\frac{2m}{n}\right). \quad (3.33)$$

Logo, de (3.32) e (3.33) obtém-se

$$\mathcal{E}(G) \leq 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-2}.$$

Agora prova-se a última parte da proposição.

Considere-se o grafo  $mK_2$ , com  $m = \frac{n}{2}$ , então

$$2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-2} = 2 + \sqrt{n-2} \sqrt{n-2} = 2 + n - 2 = n = \mathcal{E}(mK_2),$$

de acordo com (2.2).

Considere-se agora o grafo  $K_{t,t}$  para o qual se obtém  $n = 2t$  e  $m = t^2$  então

$$\begin{aligned} 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n-2} &= 2\left(\frac{2t^2}{2t}\right) + \sqrt{2t^2 - 2\left(\frac{2t^2}{2t}\right)^2} \sqrt{2t-2} \\ &= 2t + \sqrt{2t^2 - 2t^2} \sqrt{2t-2} \\ &= 2t \\ &= \mathcal{E}(K_{t,t}), \end{aligned}$$

de acordo com (2.3).

Considere-se ainda  $G$  como sendo o grafo de incidência de um design simétrico  $2 - (v, k, \tau)$  para o qual se obtém  $k = \frac{2m}{n}$  e  $\tau = \frac{k(k-1)}{v-1}$ , onde  $n = 2v$  e  $2\sqrt{m} < n < 2m$ . Os valores próprios de  $G$  são  $k$ ,  $\sqrt{k - \tau}$  (com multiplicidade  $v - 1$ ),  $-\sqrt{k - \tau}$  (com multiplicidade

$v - 1$ ), e  $-k$ . Logo, a energia deste grafo vem dada por

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(G) &= 2k + 2(v - 1)\sqrt{k - \tau} \\
 &= 2\left(\frac{2m}{n}\right) + (n - 2)\sqrt{\frac{2m}{n} - \frac{\frac{2m}{n}\left(\frac{2m}{n} - 1\right)}{\frac{n}{2} - 1}} \\
 &= 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{(n - 2)^2 \left(\frac{2m}{n} - 2\frac{2m(2m - n)}{n^2(n - 2)}\right)} \\
 &= 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{(n - 2)^2 \left(\frac{2mn^2 - 4mn - 8m^2 + 4mn}{n^2(n - 2)}\right)} \\
 &= 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n - 2}.
 \end{aligned}$$

Assim, mostrou-se que se  $G$  é quaisquer dos grafos dos pontos 1. 2. ou 3. a igualdade (3.29) verifica-se.

Reciprocamente, suponha-se que a igualdade (3.29) se verifica. De (3.32) e (3.33) obtém-se

$$\begin{aligned}
 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n - 2} &= \mathcal{E}(G) \\
 &\leq 2\lambda_1 + \sqrt{2m - 2\lambda_1^2} \sqrt{n - 2} \\
 &\leq 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n - 2}.
 \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
 2\lambda_1 + \sqrt{2m - 2\lambda_1^2} \sqrt{n - 2} &= 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2} \sqrt{n - 2} \\
 \Leftrightarrow \left(2\lambda_1 - 2\left(\frac{2m}{n}\right)\right) + \sqrt{n - 2} \left(\sqrt{2m - 2\lambda_1^2} - \sqrt{2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}\right) &= 0 \\
 \Leftrightarrow \lambda_1 &= \frac{2m}{n}.
 \end{aligned}$$

Assim  $G$  é um grafo regular de grau  $\frac{2m}{n}$  (ver Lema 1.1). Também, dado que  $G$  é um grafo bipartido por hipótese,  $\lambda_n = -\frac{2m}{n}$  (ver Proposição 1.3).

Por outro lado, a igualdade (3.29) verifica-se se e só se a desigualdade de Cauchy Schwarz (3.31) se verifica na forma de igualdade. Porém, sabe-se que esta igualdade se verifica se e só se os vetores  $[|\lambda_2| \quad |\lambda_3| \quad \dots \quad |\lambda_{n-1}|]^T$  e  $[1 \quad 1 \quad \dots \quad 1]^T$ , ambos com  $n - 2$  entradas, são linearmente dependentes, isto é, se e só se  $|\lambda_2| = |\lambda_3| = \dots = |\lambda_{n-1}|$ .

Assim, de acordo com (3.31)

$$\begin{aligned}\sum_{i=2}^{n-1} |\lambda_i| &= \sqrt{\sum_{i=2}^{n-1} \lambda_i^2} \sqrt{n-2} \\ &= \sqrt{(n-2)(2m - 2\lambda_1^2)} \\ &= \sqrt{(n-2) \left( 2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)}\end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow (n-2) |\lambda_i| = \sqrt{(n-2) \left( 2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)} \text{ para } i = 2, 3, \dots, n-1.$$

$$\Leftrightarrow |\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-2}} \text{ para } i = 2, 3, \dots, n-1,$$

ou seja,  $\lambda_i = \sqrt{\frac{2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-2}}$  ou  $\lambda_i = -\sqrt{\frac{2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-2}}$  para  $i = 2, 3, \dots, n-1$ .

Assim, têm-se as seguintes possibilidades:

1. O grafo  $G$  tem todos os valores próprios com o mesmo valor absoluto, isto é

$$\begin{aligned}\frac{2m}{n} &= \sqrt{\frac{2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2}{n-2}} \\ \Leftrightarrow \frac{2m}{n} &= \frac{\sqrt{(n-2) \left( 2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)}}{n-2} \\ \Leftrightarrow \left( \frac{2m(n-2)}{n} \right)^2 &= (n-2) \left( 2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right) \\ \Leftrightarrow \frac{(2m(n-2))^2}{n^2} &= 2m(n-2) - 2(n-2) \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \\ \Leftrightarrow 2m(n-2) &= n^2 - 4m \\ \Leftrightarrow 2mn &= n^2 \\ \Leftrightarrow m &= \frac{n}{2}.\end{aligned}$$

Assim, neste caso,  $G$  é um grafo regular de grau  $\frac{2m}{n} = 1$ . Sabe-se que cada componente conexa de um grafo regular  $G$  de grau 1 é isomorfa com o grafo  $K_2$  (ver [6, pag.

72]), e dado que  $G$  tem  $m = \frac{n}{2}$  arestas,  $G$  é o grafo  $\frac{n}{2}K_2$  cujos valores próprios são 1 e  $-1$ , ambos com multiplicidade  $\frac{n}{2}$ . Note-se que estes valores próprios satisfazem

$$\lambda_1 = \frac{2m}{n} = 1, \lambda_n = -1 \text{ e } |\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m-2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-2}} = 1 \text{ para } i = 2, 3, \dots, n-1.$$

2. O grafo  $G$  não tem todos os valores próprios com o mesmo valor absoluto.

- (a) O grafo  $G$  tem três valores próprios distintos. Consequentemente, os valores próprios distintos são  $\lambda_1 = \frac{2m}{n}$ ,  $\lambda_n = -\frac{2m}{n}$  e  $\lambda_i = 0$  para  $i = 2, 3, \dots, n-1$  (atendendo a que  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$ ). Note-se que por hipótese  $m \geq \frac{n}{2}$ , logo  $G$  não tem vértices isolados. Assim, pela Proposição 1.4,  $G$  é um grafo bipartido completo, e dado que é regular,  $G$  é o grafo  $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}$ . Assim,

$$\sqrt{\frac{2m-2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-2}} = 0$$

$$\Leftrightarrow 2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{m} = \frac{2m}{n}$$

$$\Leftrightarrow \frac{n}{2} = \sqrt{m}.$$

Consequentemente,  $G$  é o grafo  $K_{\sqrt{m}, \sqrt{m}}$ , cujos valores próprios são  $\sqrt{m}, 0, \dots, 0, -\sqrt{m}$ .

- (b) O grafo  $G$  tem quatro valores próprios distintos. Logo, os valores próprios distintos são  $\frac{2m}{n}$ ,  $\sqrt{\frac{2m-2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-2}}$ ,  $-\sqrt{\frac{2m-2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-2}}$  e  $-\frac{2m}{n}$ . Dado que  $G$  é um grafo bipartido (por hipótese da proposição) e regular de grau  $k = \frac{2m}{n}$ , cada parte da bipartição dos vértices tem cardinalidade  $\frac{n}{2}$ .

Sabe-se que a partir do espectro de um grafo  $G$  se pode verificar se  $G$  é ou não o grafo de incidência de um design simétrico (ver [6, pag. 166]). Tendo em conta que dado um design simétrico  $2 - (v, k, \tau)$  com  $v = \frac{n}{2}$ ,  $k = \frac{2m}{n}$  e  $\tau = \frac{k(k-1)}{v-1}$  se obtém um grafo de incidência com os valores próprios acima indicados, assim pode-se concluir que  $G$  é o grafo de incidência deste design. Note-se

$$\begin{aligned} \text{que os valores próprios deste grafo são } k = \frac{2m}{n}, \sqrt{k - \tau} &= \sqrt{\frac{2m}{n} - \frac{\frac{2m}{n}\left(\frac{2m}{n} - 1\right)}{\frac{n}{2} - 1}} = \\ \sqrt{\frac{2m}{n} - \frac{4m(2m-n)}{n^2(n-2)}} &= \sqrt{\frac{2mn(n-2) - 4m(2m-n)}{n^2(n-2)}} = \sqrt{\frac{2mn^2 - 8m^2}{n^2(n-2)}} = \sqrt{\frac{2m-2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}{(n-2)}} \text{ (com} \\ \text{multiplicidade } \frac{n-2}{2}) &, -\sqrt{k - \tau} = -\sqrt{\frac{2m-2\left(\frac{2m}{n}\right)^2}{n-2}} \text{ (com multiplicidade } \frac{n-2}{2}), \text{ e} \\ -k &= -\frac{2m}{n}. \end{aligned}$$

□

**Exemplo 3.3** Considere-se o grafo- $(n, m)$  completo  $K_n$  com  $n > 1$ , para o qual  $m = \frac{n(n-1)}{2}$ . Sabe-se que  $\mathcal{E}(K_n) = 2n - 2$ .

Segue-se uma tabela onde são calculados, para  $K_n$ , os minorantes obtidos nos resultados anteriores.

	Minorante para $\mathcal{E}(K_n)$
Proposição 3.1	$\frac{2m}{\lambda_1} = \frac{2}{n-1} \frac{n(n-1)}{2} = n$
Proposição 3.2	$\sqrt{2m + n(n-1)}  \det(A) ^{2/n} = \sqrt{n(n-1) + n(n-1)(n-1)^{2/n}}$ $= \sqrt{n(n-1) \left[1 + (n-1)^{2/n}\right]}$
Corolário 3.1	$\sqrt{2m + n(n-1)} = \sqrt{n(n-1) + n(n-1)} = \sqrt{2n(n-1)}$
Proposição 3.3	$2\sqrt{m} = 2\sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} = \sqrt{2n(n-1)}$
Proposição 3.4	$2\sqrt{n-1}$

Se  $n \geq 2$ , tem-se que

$$(n-2)^2 \geq 0$$

$$\Leftrightarrow n^2 \geq 4(n-1)$$

$$\Leftrightarrow n \geq 2\sqrt{n-1}, \quad (3.34)$$

e também

$$n(n-2) \geq 0$$

$$\Leftrightarrow 2n^2 - 2n \geq n^2$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{2n(n-1)} \geq n. \quad (3.35)$$

Adicionalmente,

$$n-1 \geq 1$$

$$\Leftrightarrow (n-1)^{2/n} \geq 1$$

$$\Leftrightarrow 1 + (n-1)^{2/n} \geq 2$$

$$\Leftrightarrow n(n-1) \left[1 + (n-1)^{2/n}\right] \geq 2n(n-1)$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{n(n-1) \left[1 + (n-1)^{2/n}\right]} \geq \sqrt{2n(n-1)}. \quad (3.36)$$

Consequentemente, de (3.34), (3.35) e (3.36) pode-se observar que para grafos completos com 2 ou mais vértices, o melhor minorante é dado pela Proposição 3.2.

Segue-se uma tabela onde são calculados, para  $K_n$ , os majorantes obtidos nos resultados anteriores.

	Majorante para $\mathcal{E}(K_n)$
Proposição 3.2	$\sqrt{2mn} = \sqrt{n(n-1)n} = n\sqrt{n-1}$
Corolário 3.1	$n\sqrt{n-1}$
Proposição 3.3	$2m = n(n-1)$
Teorema 3.1	$2n-2$
Proposição 3.5	$\frac{n}{2}(1+\sqrt{n})$

Dado que o majorante de  $\mathcal{E}(G)$  do Teorema 3.1 é atingido para  $G = K_n$ , analise-se os restantes majorantes.

Se  $n \geq 2$ , tem-se que

$$0 \leq n^2(n-2)(n-1)$$

$$\Leftrightarrow 0 \leq n^4 - 3n^3 + 2n^2$$

$$\Leftrightarrow n^3 - n^2 \leq n^4 - 2n^3 + n^2$$

$$\Leftrightarrow n^2(n-1) \leq (n^2 - n)^2$$

$$\Leftrightarrow n\sqrt{n-1} \leq n(n-1). \quad (3.37)$$

Analisando a função  $f(x) = 3x - 2\sqrt{x}$  com  $x \in [3, +\infty[$ , conclui-se que  $f'(x) = 3 - \frac{1}{\sqrt{x}}$ . Note-se que  $f'(x) > 0 \forall x \in [3, +\infty[$ . Assim,  $f$  é uma função crescente nesse intervalo. Logo, o minorante para  $f$  é igual a  $f(3) = 9 - 2\sqrt{3} \approx 5.53 > 5$ . Consequentemente,  $f(x) > 5 \forall x \in [3, +\infty[$ . Assim,

$$f(n) = 3n - 2\sqrt{n} > 5,$$

para  $n \geq 3$ .

$$\Leftrightarrow (1 + \sqrt{n})^2 = 1 + 2\sqrt{n} + n < 4(n-1)$$

$$\Leftrightarrow 1 + \sqrt{n} < 2\sqrt{n-1}$$

$$\Leftrightarrow \frac{n}{2}(1 + \sqrt{n}) < n\sqrt{n-1} \quad (3.38)$$

Consequentemente, de (3.37) e (3.38) pode-se observar que para grafos completos com 3 ou mais vértices, o melhor majorante é dado pela Proposição 3.5.

# Capítulo 4

## Grafos hiperenergéticos e hipoenergéticos

### 4.1 Energia de grafos hiperenergéticos

Até à década de 70 pensava-se que o grafo  $K_n$  tinha a maior energia entre todos os grafos com  $n$  vértices. Porém, em 1980 Godsil construiu um grafo com  $n$  vértices cuja energia excede a energia de  $K_n$ . Por esta razão, os grafos com  $n$  vértices cuja energia é maior que a energia de  $K_n$  são designados por grafos hiperenergéticos. O principal objetivo desta secção é estudar a energia destes grafos. Os resultados apresentados podem ser encontrados em [17, 18, 29].

**Definição 4.1** [12] *Um grafo  $G$  de ordem  $n > 1$  diz-se hiperenergético se*

$$\mathcal{E}(G) > 2n - 2.$$

Do teorema a seguir decorre a existência de famílias infinitas de grafos hiperenergéticos.

**Teorema 4.1** [29] *São famílias de grafos hiperenergéticos as seguintes:*

1. *Grafo linha de  $K_n$  para  $n \geq 5$ .*
2. *Grafo linha de  $K_{n,n}$  para  $n \geq 4$ .*
3. *Grafo linha do hiperoctaedro  $H_n$  para  $n \geq 6$ .*

**Demonstração.** *Considere-se  $K_n$ , o grafo- $(n, m)$  completo com  $n \geq 5$  e  $m = \frac{n(n-1)}{2}$ . Este é um grafo regular de grau  $n-1$ , cujos valores próprios são  $n-1$  (com multiplicidade 1) e  $-1$  (com multiplicidade  $n-1$ ). Logo, o polinómio característico de  $K_n$  vem dado por*

$$P_{K_n}(\lambda) = (\lambda - n + 1)(\lambda + 1)^{n-1}.$$

Pela Proposição 1.5, o polinómio característico do grafo linha de  $K_n$ ,  $\mathcal{L}(K_n)$ , é dado por

$$\begin{aligned}
 P_{\mathcal{L}(K_n)}(\lambda) &= (\lambda + 2)^{m-n} P_{K_n}(\lambda - (n-1) + 2) \\
 &= (\lambda + 2)^{\frac{n(n-1)}{2}-n} P_{K_n}(\lambda - n + 3) \\
 &= (\lambda + 2)^{\frac{n^2-3n}{2}} [(\lambda - n + 3) - n + 1][(\lambda - n + 3) + 1]^{n-1} \\
 &= (\lambda + 2)^{\frac{n^2-3n}{2}} (\lambda - 2n + 4)(\lambda - n + 4)^{n-1}.
 \end{aligned}$$

Consequentemente, os valores próprios de  $\mathcal{L}(K_n)$  são  $-2$  (com multiplicidade  $\frac{n^2-3n}{2}$ ),  $2n-4$  (com multiplicidade 1) e  $n-4$  (com multiplicidade  $n-1$ ). Assim,  $\mathcal{E}(\mathcal{L}(K_n))$  vem dada por

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(\mathcal{L}(K_n)) &= 2 \left( \frac{n^2-3n}{2} \right) + 2n - 4 + (n-4)(n-1) \\
 &= n^2 - n - 4 + n^2 - 5n + 4 \\
 &= 2n^2 - 6n.
 \end{aligned}$$

Pela Definição 4.1, o grafo  $\mathcal{L}(K_n)$  com  $\frac{n(n-1)}{2}$  vértices é hiperenergético se

$$\mathcal{E}(\mathcal{L}(K_n)) > 2 \left( \frac{n(n-1)}{2} \right) - 2 = n^2 - n - 2.$$

$$\Leftrightarrow 2n^2 - 6n > n^2 - n - 2$$

$$\Leftrightarrow n(n-5) > -2.$$

Dado que  $n \geq 5$ ,  $n(n-5) > -2$ . Consequentemente, o grafo  $\mathcal{L}(K_n)$  é hiperenergético.

Considere-se agora  $K_{n,n}$ , o grafo- $(2n, n^2)$  bipartido completo onde  $n \geq 4$ . Este é um grafo regular de grau  $n$ , cujos valores próprios são  $n, 0, \dots, 0, -n$ . Logo, o polinómio característico de  $K_{n,n}$  vem dado por

$$P_{K_{n,n}}(\lambda) = \lambda^{2n-2}(\lambda - n)(\lambda + n).$$

Pela Proposição 1.5, o polinómio característico do grafo linha de  $K_{n,n}$ ,  $\mathcal{L}(K_{n,n})$ , é dado por

$$\begin{aligned}
 P_{\mathcal{L}(K_{n,n})}(\lambda) &= (\lambda + 2)^{n^2-2n} P_{K_{n,n}}(\lambda - n + 2) \\
 &= (\lambda + 2)^{n^2-2n} (\lambda - n + 2)^{2n-2} [(\lambda - n + 2) - n][(\lambda - n + 2) + n] \\
 &= (\lambda + 2)^{n^2-2n} (\lambda - n + 2)^{2n-2} (\lambda - 2n + 2)(\lambda + 2) \\
 &= (\lambda + 2)^{n^2-2n+1} (\lambda - n + 2)^{2n-2} (\lambda - 2n + 2).
 \end{aligned}$$

Consequentemente, os valores próprios de  $\mathcal{L}(K_{n,n})$  são  $-2$  (com multiplicidade  $n^2-2n+1$ ),  $n-2$  (com multiplicidade  $2n-2$ ) e  $2n-2$  (com multiplicidade 1). Assim,  $\mathcal{E}(\mathcal{L}(K_{n,n}))$



vem dada por

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\mathcal{L}(K_{n,n})) &= 2(n^2 - 2n + 1) + (n - 2)(2n - 2) + 2n - 2 \\ &= 2n^2 - 4n + 2 + 2n^2 - 2n - 4n + 4 + 2n - 2 \\ &= 4n^2 - 8n + 4.\end{aligned}$$

Pela Definição 4.1, o grafo  $\mathcal{L}(K_{n,n})$  com  $n^2$  vértices é hiperenergético se

$$\mathcal{E}(\mathcal{L}(K_{n,n})) > 2n^2 - 2.$$

$$\Leftrightarrow 4n^2 - 8n + 4 > 2n^2 - 2$$

$$\Leftrightarrow 2n^2 - 8n > -6$$

$$\Leftrightarrow n(n - 4) > -3.$$

Dado que  $n \geq 4$ ,  $n(n - 4) > -3$ . Consequentemente, o grafo  $\mathcal{L}(K_{n,n})$  é hiperenergético.

Finalmente, considere-se o hiperoctaedro com  $n$  vértices  $H_n$ , que é o grafo complementar do grafo  $\frac{n}{2}K_2$ . Sabe-se que o grafo  $\frac{n}{2}K_2$  é regular de grau 1, tem  $\frac{n}{2}$  arestas e os seus valores próprios são 1 e  $-1$ , ambos com multiplicidade  $\frac{n}{2}$ . Pela Proposição 1.6, os valores próprios de  $H_n$  são  $n - 2$  (com multiplicidade 1),  $-2$  (com multiplicidade  $\frac{n}{2} - 1$ ) e 0 (com multiplicidade  $\frac{n}{2}$ ). Consequentemente, o polinómio característico de  $H_n$  vem dado por

$$P_{H_n}(\lambda) = \lambda^{\frac{n}{2}} (\lambda - n + 2) (\lambda + 2)^{\frac{n}{2} - 1}. \quad (4.1)$$

Note-se que  $H_n$  tem  $n(\frac{n}{2} - 1)$  arestas, logo, pela Proposição 1.5 e por (4.1), o polinómio característico do grafo linha de  $H_n$ ,  $\mathcal{L}(H_n)$ , é dado por

$$\begin{aligned}P_{\mathcal{L}(H_n)}(\lambda) &= (\lambda + 2)^{n(\frac{n}{2} - 1) - n} P_{H_n}(\lambda - (n - 2) + 2) \\ &= (\lambda + 2)^{n(\frac{n}{2} - 2)} P_{H_n}(\lambda - n + 4) \\ &= (\lambda + 2)^{n(\frac{n}{2} - 2)} (\lambda - n + 4)^{\frac{n}{2}} [(\lambda - n + 4) - n + 2] [(\lambda - n + 4) + 2]^{\frac{n}{2} - 1} \\ &= (\lambda + 2)^{n(\frac{n}{2} - 2)} (\lambda - n + 4)^{\frac{n}{2}} (\lambda - 2n + 6) (\lambda - n + 6)^{\frac{n}{2} - 1}.\end{aligned}$$

Consequentemente, os valores próprios de  $\mathcal{L}(H_n)$  são  $-2$  (com multiplicidade  $n(\frac{n}{2} - 2)$ ),  $n - 4$  (com multiplicidade  $\frac{n}{2}$ ),  $2n - 6$  (com multiplicidade 1) e  $n - 6$  (com multiplicidade  $\frac{n}{2} - 1$ ). Assumindo-se que  $n \geq 6$ ,  $\mathcal{E}(\mathcal{L}(H_n))$  vem dada por

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\mathcal{L}(H_n)) &= 2\left(\frac{n^2}{2} - 2n\right) + (n - 4)\frac{n}{2} + 2n - 6 + (n - 6)\left(\frac{n}{2} - 1\right) \\ &= n^2 - 4n + \frac{n^2}{2} - 2n + 2n - 6 + \frac{n^2}{2} - n - 3n + 6 \\ &= 2n^2 - 8n.\end{aligned}$$

Pela Definição 4.1, o grafo  $\mathcal{L}(H_n)$  com  $n\left(\frac{n}{2} - 1\right)$  vértices é hiperenergético se

$$\mathcal{E}(\mathcal{L}(H_n)) > 2n\left(\frac{n}{2} - 1\right) - 2.$$

$$\Leftrightarrow 2n^2 - 8n > 2n\left(\frac{n}{2} - 1\right) - 2$$

$$\Leftrightarrow 2n^2 - 8n > n^2 - 2n - 2$$

$$\Leftrightarrow n(n - 6) > -2.$$

Dado que  $n \geq 6$ ,  $n(n - 6) > -2$ . Consequentemente, o grafo  $\mathcal{L}(H_n)$  é hiperenergético.  $\square$

Sejam  $G$  um grafo- $(n, m)$  e  $\mathcal{L}(G)$  o grafo linha de  $G$ . Se os graus dos vértices de  $G$  são  $d_1, d_2, \dots, d_n$  então o número de vértices  $p$  e o número de arestas  $q$  de  $\mathcal{L}(G)$  vêm dados por:

$$\begin{aligned} p &= m \\ q &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n d_i^2 - m. \end{aligned}$$

Seja  $R = R(G)$  a matriz de incidência de ordem  $m \times n$  do grafo  $G$ . Sabe-se que:

$$R^T R = D(G) + A(G) \tag{4.2}$$

$$R R^T = 2I_p + A(\mathcal{L}(G)), \tag{4.3}$$

onde  $A(G)$  é a matriz de adjacência do grafo  $G$ ,  $D(G) = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ ,  $I_p$  é a matriz identidade de ordem  $p$ , e  $A(\mathcal{L}(G))$  é a matriz de adjacência do grafo linha de  $G$ .

Da equação (4.2) decorre que  $D(G) + A(G)$  é uma matriz definida não negativa e, consequentemente, os seus valores próprios são todos não negativos.

Considerando as matrizes

$$U = \begin{bmatrix} \lambda I_m & -R \\ O & I_n \end{bmatrix} \text{ e } V = \begin{bmatrix} I_m & R \\ R^T & \lambda I_n \end{bmatrix},$$

obtem-se

$$UV = \begin{bmatrix} \lambda I_m - R R^T & O \\ R^T & \lambda I_n \end{bmatrix} \text{ e } VU = \begin{bmatrix} \lambda I_m & O \\ \lambda R^T & \lambda I_n - R^T R \end{bmatrix}.$$

Dado que  $\det(UV) = \det(VU)$  tem-se

$$\begin{aligned} \lambda^n \det(\lambda I_m - R R^T) &= \lambda^m \det(\lambda I_n - R^T R) \\ &\Updownarrow \\ \det(\lambda I_m - R R^T) &= \lambda^{m-n} \det(\lambda I_n - R^T R) \end{aligned} \tag{4.4}$$

Consequentemente o polinómio característico de  $A(\mathcal{L}(G))$  vem dado por

$$\begin{aligned} P_{\mathcal{L}(G)}(\lambda) &= \det(\lambda I_m - A(\mathcal{L}(G))) \\ &= \det(\lambda I_m + 2I_m - RR^T) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} &= \det((\lambda + 2)I_m - RR^T) \\ &= (\lambda + 2)^{m-n} \det((\lambda + 2)I_n - R^T R) \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$= (\lambda + 2)^{m-n} \det[(\lambda + 2)I_n - (D(G) + A(G))]. \quad (4.7)$$

A igualdade (4.5) obtém-se de (4.3), a igualdade (4.6) decorre de (4.4) e, finalmente, a igualdade (4.7) obtém-se de (4.2). Note-se que se  $G$  é um grafo  $k$ -regular se obtém a Proposição 1.5.

Se os valores próprios de  $D(G) + A(G)$  são  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$ , então

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sigma_i &= \sum_{i=1}^n d_i \\ &= 2m. \end{aligned} \quad (4.8)$$

A igualdade (4.8) decorre do facto do traço de  $D(G) + A(G)$  ser igual à soma dos seus valores próprios. Consequentemente, de (4.7) tem-se que os valores próprios de  $\mathcal{L}(G)$  são  $-2$  (com multiplicidade  $m - n$ ) e  $\sigma_i - 2$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Assim, para a energia de  $\mathcal{L}(G)$  vem que:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathcal{L}(G)) &= 2(m - n) + \sum_{i=1}^n |\sigma_i - 2| \\ &\geq 2(m - n) + \sum_{i=1}^n (|\sigma_i| - 2) \\ &= 2(m - n) + \sum_{i=1}^n \sigma_i - 2n \\ &= 4(m - n). \end{aligned}$$

Equivalentemente,

$$\mathcal{E}(\mathcal{L}(G)) \geq 2(m - 1) + (2m - 4n + 2). \quad (4.9)$$

Tendo em conta a desigualdade (4.9), quando  $2m - 4n + 2 > 0$  (que é equivalente a  $m \geq 2n$ ),  $\mathcal{E}(\mathcal{L}(G)) > 2m - 2$ , isto é, o grafo  $\mathcal{L}(G)$  é hiperenergético.

Note-se que qualquer que seja o grafo  $m \leq \frac{n(n-1)}{2}$ . Logo, se  $m \geq 2n$  então  $n \geq 5$ . Assim, pode-se concluir o seguinte resultado obtido por Y. Hou e I. Gutman que estende o Teorema 4.1.

**Teorema 4.2** [17] *Seja  $n \geq 5$  e seja  $G$  um grafo- $(n, m)$ . Se  $m \geq 2n$ , então  $\mathcal{L}(G)$  é hiperenergético.*

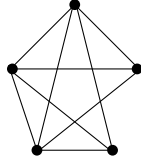


Figura 4.1: Grafo-(5, 9)

O grafo linha do grafo-(5, 9) obtido depois de se eliminar uma aresta de  $K_5$  é hipereenergético.

Por outro lado, não existem grafos-(5, 8) cujos grafos linha são hipereenergéticos [17].

Para qualquer inteiro  $m \geq 12$ , existe um inteiro  $n \geq 6$ , tal que  $2n \leq m \leq \frac{n(n-1)}{2}$ . Estas desigualdades conjuntamente com o Teorema 4.2 implicam o seguinte corolário.

**Corolário 4.1** [17] *Qualquer que seja  $m \geq 12$ , existe um grafo-( $n, m$ ) cujo grafo linha é hipereenergético.*

Até agora apenas se consideraram grafos hipereenergéticos que são grafos linha. O teorema a seguir ilustra a existência de grafos hipereenergéticos que não são grafos linha.

**Teorema 4.3** [18] *O grafo Conferência  $Cf_n$  é hipereenergético para  $n > 9$ .*

**Demonstração.** O grafo Conferência  $Cf_n$  é um grafo fortemente regular com parâmetros  $(n = 4t + 1, 2t, t - 1, t)$  para algum inteiro  $t \geq 1$  (ver Exemplo 3.2).

De acordo com (3.10), e dado que  $t \geq 1$ , os valores próprios de  $Cf_n$  são  $2t$  (valor próprio trivial) e as raízes  $r, s$  da equação quadrática

$$\begin{aligned} x^2 + [t - (t - 1)]x + (t - 2t) &= 0 \\ x^2 + x - t &= 0. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} r &= \frac{-1 + \sqrt{1 - 4(-t)}}{2} = -\frac{1 - \sqrt{1 + 4t}}{2} \\ s &= \frac{-1 - \sqrt{1 - 4(-t)}}{2} = -\frac{1 + \sqrt{1 + 4t}}{2}. \end{aligned}$$

O valor próprio  $2t$  tem multiplicidade 1, e as multiplicidades  $m_r$  de  $r$  e  $m_s$  de  $s$ , podem calcular-se a partir do sistema de equações:

$$\begin{aligned} m_r + m_s &= 4t \\ 2t + m_r \left( -\frac{1 - \sqrt{1 + 4t}}{2} \right) + m_s \left( -\frac{1 + \sqrt{1 + 4t}}{2} \right) &= 0. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Substituindo na segunda equação  $m_r$  por  $4t - m_s$  obtém-se

$$\begin{aligned}
 2t + (4t - m_s) \left( -\frac{1 - \sqrt{1 + 4t}}{2} \right) + m_s \left( -\frac{1 + \sqrt{1 + 4t}}{2} \right) &= 0 \\
 \Leftrightarrow 4t - (4t - m_s) \left( 1 - \sqrt{1 + 4t} \right) - m_s - m_s \sqrt{1 + 4t} &= 0 \\
 \Leftrightarrow 4t - \left[ 4t - 4t\sqrt{1 + 4t} - m_s + m_s\sqrt{1 + 4t} \right] - m_s - m_s \sqrt{1 + 4t} &= 0 \\
 \Leftrightarrow 4t\sqrt{1 + 4t} - 2m_s\sqrt{1 + 4t} &= 0 \\
 \Leftrightarrow m_s &= 2t.
 \end{aligned}$$

Logo de (4.10) tem-se

$$m_r = 2t.$$

Assim, a energia de  $Cf_n$  vem dada por

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(Cf_n) &= 2t + m_r |r| + m_s |s| \\
 &= 2t + 2t \left| -\frac{1 - \sqrt{1 + 4t}}{2} \right| + 2t \left| -\frac{1 + \sqrt{1 + 4t}}{2} \right| \\
 &= 2t + 2t \left| \frac{1 - \sqrt{1 + 4t}}{2} \right| + 2t \left( \frac{1 + \sqrt{1 + 4t}}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Dado que  $t \geq 1$ ,  $4t \geq 0$ , logo,  $1 - \sqrt{1 + 4t} \leq 0$ . Consequentemente,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(Cf_n) &= 2t + 2t \left( \frac{\sqrt{1 + 4t} - 1}{2} \right) + 2t \left( \frac{1 + \sqrt{1 + 4t}}{2} \right) \\
 &= 2t + 2t\sqrt{1 + 4t} \\
 &= 2 \left( \frac{n-1}{4} \right) + 2 \left( \frac{n-1}{4} \right) \sqrt{n} \\
 &= \frac{1}{2} (\sqrt{n} + 1) (n - 1).
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

A igualdade (4.11) decorre de  $n = 4t + 1$ .

Assumindo  $n > 9$ , tem-se  $\sqrt{n} > 3$ , logo,

$$\begin{aligned}
 (\sqrt{n} - 3) (n - 1) &> 0 \\
 \sqrt{n}n - \sqrt{n} - 3n + 3 &> 0 \\
 \sqrt{n}n - \sqrt{n} + n - 1 &> 3n - 3 + n - 1 \\
 (\sqrt{n} + 1) (n - 1) &> 4n - 4 \\
 \frac{1}{2} (\sqrt{n} + 1) (n - 1) &> 2n - 2.
 \end{aligned}$$

Assim,

$$\mathcal{E}(Cf_n) = \frac{1}{2} (\sqrt{n} + 1) (n - 1) > 2n - 2.$$

Consequentemente  $Cf_n$  é um grafo hiperenergético para  $n > 9$ . Note-se que se  $G$  é um grafo linha, então o seu menor valor próprio é não inferior a  $-2$  e para  $n > 9$  o menor valor próprio de  $Cf_n$  é inferior a  $-2$ .  $\square$

No artigo [27] prova-se que quase todos os grafos são hiperenergéticos. Isto significa que à medida que se consideram grafos de ordem  $n$  cada vez maior, a proporção dos grafos que são hiperenergéticos, em relação aos restantes, é cada vez maior. Ou seja, sendo  $\varphi_n(Z)$  a probabilidade de ocorrência de um grafo com a propriedade  $Z$  no conjunto dos grafos de ordem  $n$ , onde neste caso  $Z$  é a propriedade de ser hiperenergético,  $\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(Z) = 1$ .

## 4.2 Energia de grafos hipoenergéticos

O principal objetivo desta secção é estudar a energia de grafos hipoenergéticos e não hipoenergéticos. As definições e resultados apresentados podem ser encontrados em [7, 12, 14] e [12, 13, 15, 16, 22, 23, 24], respetivamente.

**Definição 4.2** [12] *Um grafo  $G$  de ordem  $n$  diz-se hipoenergético se*

$$\mathcal{E}(G) < n.$$

*Grafos para os quais*

$$\mathcal{E}(G) \geq n$$

*são chamados não hipoenergéticos.*

**Definição 4.3** [14] *Um **grafo molecular** é um grafo conexo no qual não existem vértices de grau maior que três.*

Desde o início do estudo da energia dos grafos que se sabe que para a maioria dos grafos moleculares a energia excede o número de vértices. Recentemente porém, concluiu-se que existem apenas cinco grafos moleculares que são hipoenergéticos [22].

Denota-se por  $\Delta = \Delta(G)$  o grau máximo do grafo  $G$ .

**Teorema 4.4** [24] *O grafo  $K_{2,3}$  é o único grafo conexo com  $\Delta \leq 3$ , contendo ciclos, que é hipoenergético.*

**Teorema 4.5** [13, 15] *Entre as árvores com  $\Delta \leq 3$ , existem exatamente quatro grafos hipoenergéticos. Estes são  $S_1$ ,  $S_3$ ,  $S_4$  e  $W$ , representados na Figura 4.2.*

Consequentemente, combinando o Teorema 4.4 com o Teorema 4.5, todos os grafos conexos hipoenergéticos com grau máximo menor ou igual a três foram caracterizados.

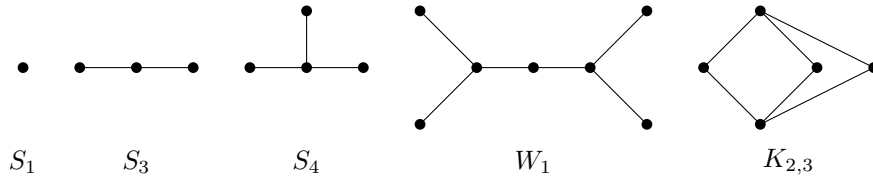


Figura 4.2: Grafos moleculares hipoenergéticos.

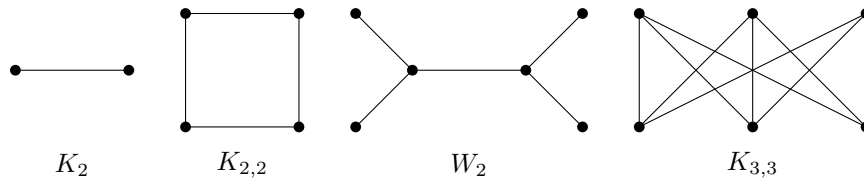


Figura 4.3: Grafos conexos com grau máximo dos vértices não superior a 3, cuja energia é igual ao número de vértices.

**Teorema 4.6** [22] *Entre os grafos conexos com  $\Delta \leq 3$ , os grafos  $S_1$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $W$  e  $K_{2,3}$  da Figura 4.2 são os únicos que são hipoenergéticos.*

**Teorema 4.7** [23] *Entre todos os grafos conexos com  $\Delta \leq 3$ , os únicos que têm energia igual ao seu número de vértices são os grafos  $K_2$ ,  $K_{2,2}$ ,  $W_2$  e  $K_{3,3}$  da Figura 4.3.*

**Teorema 4.8** [13, 15] *Entre as árvores com  $\Delta \geq 4$ , existe uma infinidade de grafos hipoenergéticos.*

Tendo em conta o Teorema 4.8, é conveniente mencionar que se o grau máximo  $\Delta$  é suficientemente grande, não é difícil encontrar grafos hipoenergéticos. Com efeito, considere-se o seguinte exemplo.

**Exemplo 4.1** *Seja  $S_n$  uma estrela com  $n$  vértices, note-se que  $\Delta = n - 1$ . De acordo com (2.4), a sua energia vem dada por*

$$\mathcal{E}(S_n) = 2\sqrt{n-1}.$$

Se  $n \geq 3$ , então

$$\begin{aligned} 0 &< (n-2)^2 \\ \Leftrightarrow 0 &< n^2 - 4n + 4 \\ \Leftrightarrow 4(n-1) &< n^2 \\ \Leftrightarrow 2\sqrt{n-1} &< n. \end{aligned}$$

Consequentemente, para  $n \geq 3$ ,  $S_n$  é hipoenergético.

**Teorema 4.9** [12] *Se  $G$  é um grafo não singular (isto é, 0 não é um valor próprio de  $G$ ) então  $G$  é não hipoenergético.*

**Demonstração.** *Pela desigualdade entre a Média Geométrica e a Média Aritmética vem que*

$$\begin{aligned} \frac{1}{n}\mathcal{E}(G) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n |\lambda_i| \\ &\geq \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n |\lambda_i|} \\ &= \sqrt[n]{|\det(A(G))|}. \end{aligned}$$

*Uma vez que  $\det(A(G))$  é necessariamente um inteiro e  $G$  é um grafo não singular, então  $|\det(A(G))| \geq 1$ . Logo,  $\sqrt[n]{|\det(A(G))|} \geq 1$ . Assim,*

$$\frac{1}{n}\mathcal{E}(G) \geq 1.$$

*Consequentemente,  $G$  é não hipoenergético.* □

**Teorema 4.10** [12] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$ . Se  $m \geq \frac{n^2}{4}$ , então  $G$  é não hipoenergético.*

**Demonstração.** *Sabe-se, pela Proposição 3.3, que para todo o grafo- $(n, m)$   $G$ ,*

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{m}.$$

*Se  $m \geq \frac{n^2}{4}$ , então  $2\sqrt{m} \geq n$ . Assim,  $\mathcal{E}(G) \geq n$ , ou seja,  $G$  é não hipoenergético.* □

**Definição 4.4** [7] *Para um inteiro  $k \geq 0$ , o  $k$ -ésimo momento espectral de um grafo  $G$  com valores próprios  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  define-se como sendo*

$$M_k = M_k(G) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i)^k.$$

*Note-se que  $M_k = \text{tr}(A^k(G))$ , onde as entradas diagonais da matriz  $A^k(G)$  correspondem ao número de passeios de comprimento  $k$  que começam e terminam no mesmo vértice. Por conveniência,  $A^0(G) = I$ .*

**Observação 4.1** *O 4-ésimo momento espectral  $M_4(G)$  de um grafo- $(n, m)$ ,  $G$ , é a soma do número de passeios de comprimento 4 que começam e terminam no vértice  $i$ , para  $i = 1, \dots, n$ . Note-se que o número de passeios de comprimento 4 que começam e terminam no vértice  $i$ , fica determinado pela expressão*

$$d_i + s_i + 2t_i + 2l_i,$$



onde  $d_i$  corresponde ao grau do vértice  $i$ ,  $s_i$  é o número de caminhos de comprimento 2 com vértice inicial  $i$ ,  $t_i$  é o número de quadrângulos aos quais o vértice  $i$  pertence, e  $l_i$  corresponde ao número de caminhos de comprimento 2 para os quais  $i$  é o vértice central. Assim,

$$M_4(G) = \sum_{i=1}^n d_i + \sum_{i=1}^n s_i + 2 \sum_{i=1}^n t_i + 2 \sum_{i=1}^n l_i. \quad (4.12)$$

Se  $G$  tem  $Q$  quadrângulos então

$$\begin{aligned} M_4(G) &= 2m + \sum_{ij \in E(G)} (d_i + d_j - 2) + 8Q + 2 \sum_{i=1}^n \binom{d_i}{2} \\ &= 2m + \sum_{ij \in E(G)} (d_i + d_j) - 2m + 8Q + 2 \sum_{i=1}^n \frac{d_i!}{(d_i - 2)!2!} \\ &= \sum_{i=1}^n d_i^2 + 8Q + \sum_{i=1}^n d_i(d_i - 1) \\ &= 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + 8Q - \sum_{i=1}^n d_i \\ &= 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + 8Q - 2m. \end{aligned} \quad (4.13)$$

**Exemplo 4.2** Considere-se o grafo  $G$  da Figura 4.4. Utilizando a mesma notação da Observação 4.1 tem-se que

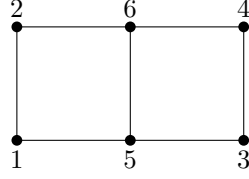
$$\begin{aligned} d_i + s_i + 2t_i + 2l_i &= 2 + 3 + 2 + 2 = 9 \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4 \\ d_i + s_i + 2t_i + 2l_i &= 3 + 4 + 4 + 6 = 17 \quad \text{para } i = 5, 6. \end{aligned}$$

De acordo com (4.12), o 4-ésimo momento espectral  $M_4(G)$  de  $G$  vem dado por

$$\begin{aligned} M_4(G) &= \sum_{i=1}^6 (d_i + s_i + 2t_i + 2l_i) \\ &= 4 \times 9 + 2 \times 17 = 70. \end{aligned}$$

Por outro lado, de acordo com (4.13)

$$\begin{aligned} M_4(G) &= 2 \sum_{i=1}^6 d_i^2 + 8Q - 2m \\ &= 2(4 \times 2^2 + 2 \times 3^2) + 16 - 14 \\ &= 70. \end{aligned}$$


 Figura 4.4: Grafo  $G$  do Exemplo 4.2
 

---

**Lema 4.1** [16] *Seja  $G$  um grafo regular de grau  $r \geq 0$ , com  $n$  vértices. Então*

$$M_4(G) \leq nr^3.$$

*Adicionalmente, verifica-se a igualdade  $M_4(G) = nr^3$  se e só se  $G$  consiste em  $a$  cópias do grafo bipartido completo  $K_{r,r}$ , onde  $a \geq 1$ .*

**Teorema 4.11** [12] *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  que contém  $Q$  quadrângulos e sejam  $d_1, d_2, \dots, d_n$  os graus dos vértices de  $G$ . Se*

$$M_2(G) \sqrt{\frac{M_2(G)}{M_4(G)}} = 2m \sqrt{\frac{2m}{2\sum_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8Q}} \geq n, \quad (4.14)$$

*então  $G$  é não hipoenergético.*

**Demonstração.** *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$ , e sejam  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  os valores próprios de  $G$ . Pela desigualdade de Cauchy Schwarz aplicada aos vetores*

$$[\sqrt{|\lambda_1|} \quad \sqrt{|\lambda_2|} \quad \dots \quad \sqrt{|\lambda_n|}]^T \text{ e } [\sqrt{|\lambda_1|^3} \quad \sqrt{|\lambda_2|^3} \quad \dots \quad \sqrt{|\lambda_n|^3}]^T,$$

*tem-se que*

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 &= [\sqrt{|\lambda_1|} \quad \sqrt{|\lambda_2|} \quad \dots \quad \sqrt{|\lambda_n|}] \begin{bmatrix} \sqrt{|\lambda_1|^3} \\ \sqrt{|\lambda_2|^3} \\ \vdots \\ \sqrt{|\lambda_n|^3} \end{bmatrix} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^n |\lambda_i|} \sqrt{\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^3}. \\ &\Leftrightarrow \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \right)^4 \leq \left[ \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right) \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^3 \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (4.15)$$

*Aplicando novamente a desigualdade Cauchy Schwarz aos vetores*

$$[|\lambda_1| \quad |\lambda_2| \quad \dots \quad |\lambda_n|]^T \text{ e } [\lambda_1^2 \quad \lambda_2^2 \quad \dots \quad \lambda_n^2]^T$$

obtem-se

$$\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^3 = \begin{bmatrix} |\lambda_1| & |\lambda_2| & \cdots & |\lambda_n| \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^2 \\ \lambda_2^2 \\ \vdots \\ \lambda_n^2 \end{bmatrix} \leq \sqrt{\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2\right) \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^4\right)}.$$

Da equação (4.15), decorre

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2\right)^4 &\leq \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i|\right)^2 \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2\right) \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^4\right) \\ \Leftrightarrow \frac{\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2\right)^3}{\sum_{i=1}^n \lambda_i^4} &\leq \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i|\right)^2 \\ \Leftrightarrow \mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| &\geq \sqrt{\frac{\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2\right)^3}{\sum_{i=1}^n \lambda_i^4}} = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2\right) \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i^2}{\sum_{i=1}^n \lambda_i^4}}. \end{aligned}$$

Pela Definição 4.4 segue-se

$$\mathcal{E}(G) \geq M_2(G) \sqrt{\frac{M_2(G)}{M_4(G)}}. \quad (4.16)$$

Tendo em conta a Proposição 1.1 e a expressão (4.13), tem-se

$$M_2(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m. \quad (4.17)$$

e

$$M_4(G) = 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8Q, \quad (4.18)$$

respetivamente. Logo, procedendo às respetivas substituições em (4.16) obtém-se

$$\mathcal{E}(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8Q}}.$$

Consequentemente, se a desigualdade

$$2m \sqrt{\frac{2m}{2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8Q}} \geq n$$

se verifica, então  $G$  é não hipoenergético. □

Como consequência deste teorema, pode-se apresentar o corolário a seguir.

**Corolário 4.2** *Seja  $G$  um grafo- $(n, m)$  sem quadrângulos e sejam  $d_1, d_2, \dots, d_n$  os graus dos seus vértices. Se*

$$m \geq \sqrt[3]{\left(\frac{n}{2}\right)^2 \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - m\right)}, \quad (4.19)$$

*então  $G$  é não hipoenergético.*

**Demonstração.** *Suponha-se que*

$$\begin{aligned} m &\geq \sqrt[3]{\left(\frac{n}{2}\right)^2 \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - m\right)} \\ \Leftrightarrow m^3 &\geq \left(\frac{n}{2}\right)^2 \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - m\right) \\ \Leftrightarrow (2m)^2 &\geq \frac{n^2}{m} \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - m\right) \\ \Leftrightarrow 2m &\geq n \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n d_i^2 - m}{m}} \\ \Leftrightarrow 2m \sqrt{\frac{m}{\sum_{i=1}^n d_i^2 - m}} &\geq n. \end{aligned}$$

Tendo em conta o Teorema 4.11 quando  $Q = 0$ ,  $G$  é um grafo não hipoenergético.  $\square$

**Exemplo 4.3** *Considere-se o grafo  $G$  da Figura 4.5.*

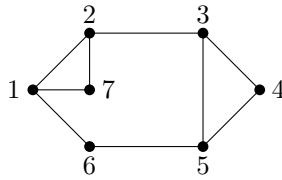


Figura 4.5: Grafo  $G$  sem quadrângulos que satisfaz (4.19)

*Este grafo não tem quadrângulos.*

Note-se que para este grafo,  $n = 7$ ,  $m = 9$ ,  $d_1 = 3$ ,  $d_2 = 3$ ,  $d_3 = 3$ ,  $d_4 = 2$ ,  $d_5 = 3$ ,  $d_6 = 2$ , e  $d_7 = 2$ . Então,

$$\sqrt[3]{\left(\frac{n}{2}\right)^2 \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - m\right)} = \sqrt[3]{(3.5)^2 (48 - 9)} \approx 7.81 < 9.$$

Logo  $G$  satisfaz a condição (4.19) e consequentemente é não hipoenergético.

Note-se que o Teorema 4.11 apresenta uma condição suficiente, mas não necessária, para que o grafo- $(n, m)$   $G$  seja não hipoenergético. Por exemplo, considere-se o grafo- $(6, 5)$   $W_2$  do Teorema 4.7. Dado que  $\mathcal{E}(W_2) = n$ ,  $W_2$  é não hipoenergético. Ainda assim, para este grafo tem-se,

$$2m \sqrt{\frac{2m}{2 \prod_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8Q}} = 10 \sqrt{\frac{10}{2(4 \times 1 + 2 \times 9) - 10}} \approx 5.42 < 6 = n.$$

Assim,  $W_2$  trata-se de um grafo não hipoenergético, para o qual a condição (4.14) não se verifica.

**Teorema 4.12** [16] *Se  $G$  é um grafo- $(n, m)$  regular de grau  $r \geq 1$ , então  $G$  é não hipoenergético. Adicionalmente, verifica-se a igualdade  $\mathcal{E}(G) = n$  se e só se  $G$  consiste em  $a$  cópias do grafo bipartido completo  $K_{r,r}$ , onde  $a \geq 1$ .*

**Demonstração.** *Pela Proposição 3.1, tem-se que*

$$\mathcal{E}(G) \geq \frac{2m}{\lambda_1}.$$

Para grafos regulares de grau  $r$ ,  $\lambda_1 = r$  e  $2m = nr$ . Logo,

$$\mathcal{E}(G) \geq n.$$

A segunda parte do teorema prova-se da seguinte forma. De acordo com (2.3), se  $G$  consiste em  $a$  cópias de  $K_{r,r}$ , a energia de  $G$  é

$$\mathcal{E}(G) = a\mathcal{E}(K_{r,r}) = a \left(2\sqrt{r^2}\right) = 2ar = n.$$

Reciprocamente, suponha-se que a igualdade  $\mathcal{E}(G) = n$  se verifica. De (4.16) decorre

$$n \geq nr \sqrt{\frac{nr}{M_4(G)}}$$

$$\Leftrightarrow M_4(G) \geq r^2(nr) = nr^3.$$

Uma vez que pelo Lema 4.1  $M_4(G) \leq nr^3$ , combinando as duas desigualdades obtém-se

$$M_4(G) = nr^3. \quad (4.20)$$

Finalmente, do Lema 4.1 resulta que a igualdade (4.20) se verifica quando  $G$  consiste em  $a$  cópias do grafo bipartido completo  $K_{r,r}$ , com  $a \geq 1$ .  $\square$

**Definição 4.5** [12] *Sejam  $a$  e  $b$  inteiros tais que  $1 \leq a < b$ . Um grafo diz-se  $(a, b)$ -biregular se o grau de cada um dos seus vértices tem apenas dois valores possíveis  $a$  ou  $b$ .*

Na Figura 4.6 são representados alguns exemplos de grafos  $(a, b)$ -biregulares.

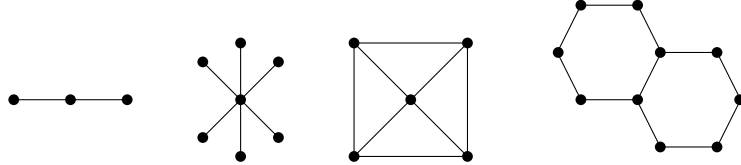


Figura 4.6: árvore  $(1, 2)$ -biregular, árvore  $(1, 6)$ -biregular, grafo  $(3, 4)$ -biregular, e grafo  $(2, 3)$ -biregular

Se  $T$  é uma árvore  $(a, b)$ -biregular com  $n$  vértices, então é claro que o número de quadrângulos numa árvore é igual a zero, isto é,  $Q = 0$ .

Dado que as árvores têm necessariamente vértices de grau 1 (vértices pendent), no caso de ser  $(a, b)$ -biregulares,  $a = 1$  e  $1 < b \leq n - 1$ . Note-se que estas árvores têm pelo menos 3 vértices e  $m = n - 1$  arestas. Denota-se o número de vértices pendent de um grafo por  $\delta(G) = \delta$ .

No que se segue ir-se-á calcular  $M_2(T)$  e  $M_4(T)$ .

Se  $n_b$  é o número de vértices de  $T$  de grau  $b$ , então tem-se o seguinte sistema de equações

$$\begin{aligned} \delta + n_b &= n \\ 1 \cdot \delta + b \cdot n_b &= \sum_{i=1}^n d_i = 2m = 2(n - 1). \end{aligned} \tag{4.21}$$

Subtraindo a primeira equação à segunda obtém-se

$$(b - 1)n_b = n - 2,$$

assim

$$n_b = \frac{n - 2}{b - 1}. \tag{4.22}$$

Substituindo (4.22) em (4.21) tem-se

$$\delta = n - \frac{n - 2}{b - 1} = \frac{nb - n - n + 2}{b - 1} = \frac{2 + n(b - 2)}{b - 1}.$$

Além disso,

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^n d_i^2 &= 1^2 \cdot \delta + b^2 \cdot n_b \\
 &= \frac{2 + n(b-2)}{b-1} + b^2 \left( \frac{n-2}{b-1} \right) \\
 &= \frac{2 + nb - 2n + nb^2 - 2b^2}{b-1} \\
 &= \frac{2 + 2nb - nb - 2n + nb^2 - 2b^2 + 2b - 2b}{b-1} \\
 &= \frac{(nb + 2n - 2b - 2)(b-1)}{b-1} \\
 &= n(b+2) - 2(b+1).
 \end{aligned}$$

De acordo com (4.17) e (4.18), os momentos espectrais  $M_2(T)$  e  $M_4(T)$  para uma árvore biregular  $T$  vêm dados por

$$M_2(T) = 2(n-1)$$

e

$$\begin{aligned}
 M_4(T) &= 2[n(b+2) - 2(b+1)] - 2(n-1) \\
 &= 2nb + 4n - 4b - 4 - 2n + 2 \\
 &= 2b(n-2) + 2(n-1),
 \end{aligned}$$

respetivamente.

O Teorema 4.13 apresenta uma condição necessária e suficiente para que a desigualdade (4.14) seja satisfeita.

**Teorema 4.13** [12] *Seja  $T$  uma árvore  $(1, b)$ -biregular com  $n$  vértices. Então a desigualdade (4.14) verifica-se se e só se  $b = 2$  e  $n \geq 5$ .*

**Demonstração.** *Para uma árvore  $(1, b)$ -biregular com  $n$  vértices, a desigualdade (4.14) é dada pela expressão:*

$$2(n-1) \sqrt{\frac{2(n-1)}{2b(n-2) + 2(n-1)}} \geq n$$

$$\begin{aligned}
 &\Leftrightarrow 2(n-1) \sqrt{\frac{(n-1)}{b(n-2) + (n-1)}} \geq n \\
 &\Leftrightarrow \sqrt{\frac{4(n-1)^3}{b(n-2) + (n-1)}} \geq n \\
 &\Leftrightarrow \frac{4(n-1)^3}{n^2} \geq b(n-2) + (n-1) \\
 &\Leftrightarrow \frac{4(n-1)^3 - n^2(n-1)}{n^2(n-2)} \geq b \\
 &\Leftrightarrow \frac{4(n^3 - 3n^2 + 3n - 1) - n^3 + n^2}{n^2(n-2)} \geq b \\
 &\Leftrightarrow \frac{3n^3 - 11n^2 + 12n - 4}{n^2(n-2)} \geq b \\
 &\Leftrightarrow \frac{3n^3 - 5n^2 - 6n^2 + 10n + 2n - 4}{n^2(n-2)} \geq b \\
 &\Leftrightarrow \frac{(3n^2 - 5n + 2)(n-2)}{n^2(n-2)} \geq b \\
 &\Leftrightarrow \frac{3n^2 - 5n + 2}{n^2} \geq b. \tag{4.23}
 \end{aligned}$$

Dado que  $b > 1$ , tem-se

$$\begin{aligned}
 \frac{3n^2 - 5n + 2}{n^2} \geq 2 &\Leftrightarrow n^2 - 5n + 2 \geq 0 \\
 &\Leftrightarrow \left(n - \frac{5 + \sqrt{17}}{2}\right) \left(n - \frac{5 - \sqrt{17}}{2}\right) \geq 0 \\
 &\Leftrightarrow \begin{cases} n \geq \frac{5 + \sqrt{17}}{2} & \wedge & n \geq \frac{5 - \sqrt{17}}{2} \\ & ou \\ n \leq \frac{5 + \sqrt{17}}{2} & \wedge & n \leq \frac{5 - \sqrt{17}}{2} \end{cases}.
 \end{aligned}$$

Consequentemente,  $n \geq 5$ .

Analisando a função

$$f(x) = \frac{3x^2 - 5x + 2}{x^2},$$

com  $x \in [5, +\infty[$ , conclui-se que

$$\begin{aligned}
 f'(x) &= \frac{(6x - 5)x^2 - 2x(3x^2 - 5x + 2)}{x^4} \\
 &= \frac{5x^2 - 4x}{x^4} \\
 &= \frac{5x - 4}{x^3}.
 \end{aligned}$$



Note-se que  $f'(x) > 0 \forall x \in [5, +\infty[$ . Assim,  $f$  é uma função crescente nesse intervalo. Logo, o menorante para  $f$  é igual a  $f(5) = \frac{52}{25} = 2.08$ . Adicionalmente, uma vez que  $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 3$ , o maiorante para  $f$  é igual a 3. Assim,  $2.08 \leq f(x) \leq 3$ , para todo  $x \in [5, +\infty[$ . De (4.23) se tem que  $f(n) \geq b$ , conseqüentemente,  $b = 2$ .  $\square$

Note-se que, de acordo com o Teorema 4.13, as únicas árvores biregulares que satisfazem a desigualdade (4.14) são os caminhos com pelo menos 5 vértices.

Agora analisar-se-á os grafos conexos  $(a, b)$ -biregulares unicíclicos para os quais a desigualdade (4.14) se verifica.

Seja  $\Gamma$  um grafo- $(n, m)$  conexo  $(a, b)$ -biregular unicíclico. Para estes grafos tem-se que  $m = n$ .

Comece-se por calcular  $M_2(\Gamma)$  e  $M_4(\Gamma)$ .

Se  $n_b$  o número de vértices de  $\Gamma$  de grau  $b$ , então tem-se o seguinte sistema de equações

$$\begin{aligned} \delta + n_b &= n \\ 1 \cdot \delta + b \cdot n_b &= \sum_{i=1}^n d_i = 2m = 2n. \end{aligned} \tag{4.24}$$

Subtraindo a primeira equação à segunda equação obtém-se

$$(b - 1)n_b = n,$$

assim

$$n_b = \frac{n}{b - 1}. \tag{4.25}$$

Substituindo (4.25) em (4.24) tem-se

$$\delta = n - \frac{n}{b - 1} = \frac{nb - n - n}{b - 1} = \frac{n(b - 2)}{b - 1}.$$

Além disso,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n d_i^2 &= 1^2 \cdot \delta + b^2 \cdot n_b \\ &= \frac{n(b - 2)}{b - 1} + b^2 \left( \frac{n}{b - 1} \right) \\ &= \frac{nb - 2n + nb^2}{b - 1} \\ &= \frac{2nb - nb - 2n + nb^2}{b - 1} \\ &= \frac{n(b + 2)(b - 1)}{b - 1} \\ &= n(b + 2). \end{aligned}$$

De acordo com (4.17) e (4.18), se  $\Gamma$  tem  $Q$  quadrângulos, os momentos espectrais  $M_2(\Gamma)$  e  $M_4(\Gamma)$  vêm dados por

$$M_2(\Gamma) = 2n$$

e

$$\begin{aligned} M_4(\Gamma) &= 2n(b+2) - 2n + 8Q \\ &= 2n(b+1) + 8Q, \end{aligned}$$

respetivamente.

O teorema a seguir apresenta mais uma condição necessária e suficiente para que a desigualdade (4.14) seja satisfeita.

Antes porém, note-se que qualquer grafo- $(n, m)$  conexo  $(a, b)$ -biregular unicíclico é tal que  $a = 1$  e  $b \geq 3$  (e recorde-se que  $n = m$ ).

**Teorema 4.14** [12] *Seja  $\Gamma$  um grafo- $(n, n)$  conexo  $(1, b)$ -biregular unicíclico. Então a desigualdade (4.14) verifica-se se e só se  $\Gamma$  não tem quadrângulos e  $b = 3$ .*

**Demonstração.** Para um grafo- $(n, n)$  conexo  $(a, b)$ -biregular unicíclico com  $Q$  quadrângulos  $\Gamma$ , a desigualdade (4.14) é dada pela expressão:

$$\begin{aligned} 2n \sqrt{\frac{2n}{2n(b+1) + 8Q}} &\geq n \\ \Leftrightarrow \sqrt{\frac{8n^3}{2n(b+1) + 8Q}} &\geq n \\ \Leftrightarrow \frac{8n^3}{n^2} &\geq 2n(b+1) + 8Q \\ \Leftrightarrow \frac{8(n-Q) - 2n}{2n} &\geq b \\ \Leftrightarrow \frac{6n - 8Q}{2n} &\geq b \\ \Leftrightarrow 3 - \frac{4Q}{n} &\geq b \end{aligned} \tag{4.26}$$

Uma vez que  $\Gamma$  é um grafo unicíclico, o número  $Q$  de quadrângulos é igual a 0 ou 1. Se  $Q = 0$ , de (4.26) decorre que  $b \leq 3$ , e dado que  $b \geq 3$ , conclui-se  $b = 3$ .

Se  $Q = 1$ , de (4.26) decorre que  $b \leq 3 - \frac{4}{n}$ , logo,  $b < 3$ , o que é impossível, dado que  $b \geq 3$ .  $\square$

A Figura 4.7 ilustra alguns exemplos de grafos biregulares que satisfazem o Teorema 4.14.

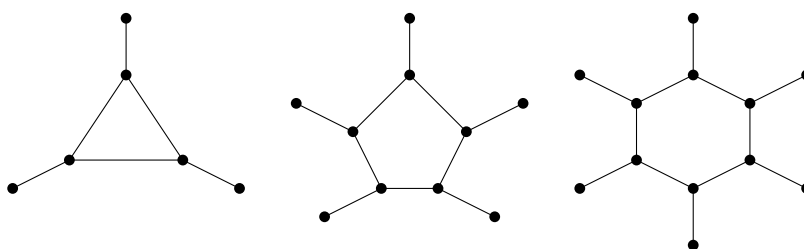


Figura 4.7: Exemplos de grafos conexos  $(1,3)$ -biregulares unicíclicos sem quadrângulos



# Capítulo 5

## Conclusões

O estudo da energia dos grafos tem como principal motivação a estreita relação existente entre a energia total  $\pi$ -*electron* de uma molécula e a soma dos valores absolutos dos valores próprios do grafo (molecular) que a representa.

Neste trabalho começa-se por introduzir os conceitos básicos e terminologia necessários para o bom entendimento desta dissertação, assim como alguns resultados utilizados ao longo do texto.

No segundo capítulo apresenta-se a definição de energia de um grafo introduzida por I. Gutman em 1978 [9] e determina-se a energia de alguns grafos particulares, mediante aplicação de resultados apresentados na introdução, ou através do cálculo direto dos seus valores próprios. Neste contexto, os valores próprios dos grafos  $C_n$  e  $P_n$  são determinados com recurso a resultados básicos da teoria das matrizes circulantes e matrizes tridiagonais simétricas, respetivamente.

No Capítulo 3 apresentam-se minorantes e majorantes para a energia de um grafo destacando-se os obtidos por McClelland em 1971 [25], utilizando a desigualdade entre as médias geométricas e aritmética, e os majorantes obtidos por J. Koolen e V. Moulton em [19]. Caracteriza-se uma família de grafos para os quais os majorantes em [19] são atingidos e demonstra-se que o majorante de J. Koolen e V. Moulton é melhor do que o obtido por McClelland [19]. Adicionalmente, apresenta-se um majorante obtido por J. Koolen e V. Moulton em [20] para grafos bipartidos bem como uma família de grafos bipartidos para os quais este majorante é atingido.

Finaliza-se este capítulo, testando alguns dos majorantes estudados para o grafo completo  $K_n$  com  $n$  vértices, concluindo-se que o melhor minorante para este grafo quando  $n \geq 2$  é o obtido por B. McClelland em [25], e o melhor majorante para  $K_n$  quando  $n \geq 3$  é o obtido por J. Koolen e V. Moulton em [19].

Até à década de 70 pensava-se que o grafo completo com  $n$  vértices  $K_n$  tinha a maior energia entre todos os grafos com  $n$  vértices. Porém, em 1980 Godsil construiu um grafo com  $n$  vértices cuja energia excede a energia de  $K_n$ . Por esta razão, os grafos cuja energia excede a energia de  $K_n$  são designados por grafos hiperenergéticos. O quarto capítulo começa precisamente com o estudo deste tipo de grafos apresentando-se famílias de grafos linha hiperenergéticos introduzidos em [29] e caracterizam-se os grafos para os quais os

grafos linha são hiperenergéticos [17]. Também se apresenta um grafo hiperenergético que não é grafo linha [18]. Neste capítulo refere-se ainda o resultado obtido em [27] segundo o qual quase todos os grafos são hiperenergéticos.

Um grafo cuja energia é menor do que o seu número de vértices é chamado grafo hipoenergético, e um grafo cuja energia é maior ou igual que o seu número de vértices é chamado grafo não hipoenergético. A segunda parte do quarto capítulo é dedicada ao estudo da energia deste tipo de grafos.

Desde o início do estudo da energia dos grafos que se sabe que a maioria dos grafos moleculares são não hipoenergéticos. Recentemente porém, concluiu-se que existem apenas cinco grafos moleculares que são hipoenergéticos [22]. Estes cinco grafos são apresentados nesta dissertação juntamente os quatro grafos moleculares cuja energia é igual ao número de vértices [23]. Apresentam-se ainda as demonstrações de alguns resultados sobre grafos não hipoenergéticos que podem ser obtidos de maneira simples e introduz-se uma condição suficiente para que um grafo seja não hipoenergético.

Finalmente, com o objetivo de se obterem condições necessárias e suficientes para que um grafo seja não hipoenergético estuda-se o caso particular dos grafos biregulares e biregulares unicíclicos.

# Bibliografia

- [1] N.M.M.Abreu, R.R. Del-Vecchio, C.T.M. Vinagre, D. Stevanović, *Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações*, SBMAC, 2007.
- [2] N. Biggs, *Algebraic Graph Theory*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK , 1993.
- [3] R.A. Brualdi, *Energy of a Graph*. <http://www.public.iastate.edu/~lhogben/energyB.pdf>
- [4] G. Caporossi, D. Cvetković, I. Gutman, B. Hansen, *Variable neighborhood graphs 2. Finding graphs with extreme energy*, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 39, 1999, 984- 996.
- [5] D. M. Cardoso, J. Szymański, M. Rostami, *Matemática Discreta*, Escolar Editora, 2009.
- [6] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of graphs – Theory and applications, Third ed.*, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg, Leipzig, 1995.
- [7] D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić, *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*, London Mathematical Society Student Texts 75. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [8] I. Gutman, *A graph theoretical study of conjugated systems containing a linear polyene fragment*, Croat. Chem. Acta, 48(2), 1976, 97–108.
- [9] I. Gutman, *The energy of a graph*, Ber. Math-Statist. Sect. Forschungsz. Graz 103, 1978, 1–22.
- [10] I. Gutman, *Bounds for total  $\pi$ -electron energy of conjugated hydrocarbons*, IZ. Phys. Chem. (Leipzig) 266, 1985, 59–64.
- [11] I. Gutman, *The energy of a graph: old and new results*, In Algebraic Combinatorics and Applications, A. Betten, A. Kohner, R. Laue, and A. Wassermann, eds., Springer, Berlin, 2001, 196-211.
- [12] I. Gutman, *In Hyperenergetic and Hypoenergetic Graphs*, ed. by D. Cvetković, I. Gutman. Selected Topics on Applications of Graph Spectra Mathematical Institute, Belgrade, 2011, 113–135.

- [13] I. Gutman, X. Li, Y. Shi, J. Zhang, *Hypoenergetic trees*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 60, 2008, 415–426.
- [14] I. Gutman, O. E. Polansky, *The energy of graphs and matrices*, Mathematical Concepts in Organic Chemistry, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [15] I. Gutman, S. Radenković, *Hypoenergetic molecular graphs*, Indian J. Chem. 46A, 2007, 1733–1736.
- [16] I. Gutman, S. Zare Firoozabadi, J. A. de la Peña, J. Rada, *On the energy of regular graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 57, 2007, 435–442.
- [17] Y. Hou, I. Gutman, *Hyperenergetic line graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 43, 2001, 29–39.
- [18] J. Koolen, V. Moulton, I. Gutman, D. Vidović, *More hyperenergetic molecular graphs*, J. Serb. Chem. Soc. 65 (8), 2000, 571–575.
- [19] J. Koolen, V. Moulton, *Maximal energy graphs*, Advances in Appld. Math., 26, 2001, 47–52.
- [20] J. Koolen, V. Moulton, *Maximal energy bipartite graphs*, Graphs and Combinatorics, 19, 2003, 131–135.
- [21] P. Lancaster, M. Timenetsky, *The Theory of Matrices*, Academic Press, New York, 1985.
- [22] X. Li, H. Ma, *All hypoenergetic graphs with maximum degree at most 3*, Lin. Algebra Appl. 431, 2009, 2127–2133.
- [23] X. Li, H. Ma, *All connected graphs with maximum degree at most 3 whose energies are equal to the number of vertices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 64, 2010, 7–24.
- [24] X. Li, Y. Shi, I. Gutman, *Graph Energy*, Springer, 2012.
- [25] B. McClelland, *Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of  $\pi$ -electron energies*, J. Chem. Phys. 54, 1971, 640–643.
- [26] C. Meyer, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [27] V. Nikiforov, *The energy of graphs and matrices*, J. Math. Anal. Appl. 326, 2007, 1472–1475.
- [28] D. Serre, *Matrices: Theory and Applications*, Springer, New York, 2002.
- [29] H. B. Walikar, H. S. Ramane, P. R. Hampiholi, *On the energy of a graph in: R. Balakrishnan, H. M. Mulder, A. Vijayakumar, Eds.*, Graph Connections, Allied Publishers, New Delhi, 1999, 120–123.



- [30] Z. You, B. Liu, *On hypoenergetic unicyclic and bicyclic graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 61, 2009, 479–486.